

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Departamento de Física Aplicada III (Electricidad y
Electrónica)



SINTESIS OPTIMIZADA DE LENTES ELECTROSTÁTICAS
PARA EL ENFOQUE DE PARTÍCULAS CARGADAS A
ENERGÍAS DE keV y meV

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PRESENTADA POR

Abdelhalim Azbaid,

Bajo la dirección de la doctora
Genoveva Martínez López

Madrid, 2003

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE



5314276325

**SÍNTESIS OPTIMIZADA DE LENTES
ELECTROSTÁTICAS PARA EL ENFOQUE
DE PARTÍCULAS CARGADAS A ENERGÍAS
DE keV Y MeV**

TESIS DOCTORAL

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

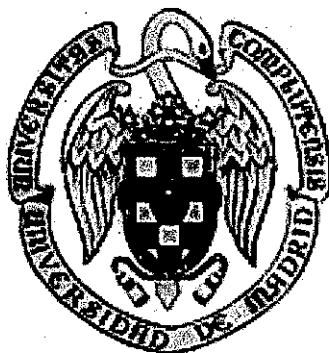
REGISTRO DE LIBROS
BIBLIOTECA

N.º REGISTRO 27.510

Abdelhalim Azbaid

Diciembre 1999

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS



**SÍNTESIS OPTIMIZADA DE LENTES
ELECTROSTÁTICAS PARA EL ENFOQUE
DE PARTÍCULAS CARGADAS A ENERGÍAS
DE keV Y MeV**

Tesis doctoral presentada por: Abdelhalim Azbaid
Dirección: Genoveva Martínez Lopez
Madrid, Diciembre de 1999

A mis padres

ÍNDICE

Agradecimientos.....	v
Planteamiento e interés de la tesis.....	vii
Objetivos y organización.....	viii

Capítulo 1

Técnicas numéricas para el estudio de lentes electrostáticas

1.1 Introducción.....	3
1.2 Solución numérica del problema electrostático.....	4
1.2.1 Método de Elementos de Contorno.....	5
1.2.2 Aplicación al problema del cuadrupolo electrostático.....	8
1.2.2.1 Estrategia de la división de la geometría del sistema.....	9
1.2.2.2 Determinación de los elementos de la matriz y las densidades de carga sobre los cilindros.....	10
1.2.3 Optimización de la solución numérica.....	14
1.3 Solución numérica del problema de la integración de trayectorias.....	22
1.3.1 Ecuaciones de las trayectorias.....	22
1.3.2 Métodos mono-etapa.....	24
1.3.2.1 Método de Euler-Richardson.....	25
1.3.2.2 Métodos de Runge-Kutta.....	26
1.3.2.3 Fórmulas de Runge-Kutta-Fehlberg.....	27
1.3.3 Métodos multi-etapa.....	29
1.3.3.1 Método de dos etapas.....	30
1.3.3.2 Método de Adams-Moulton $O(h^4)$	31

1.3.4 Control del paso y selección del método de integración.....	31
1.4 Bibliografía.....	34

Capítulo 2

Síntesis optimizada de lentes electrostáticas con simetría de rotación

2.1 Introducción.....	39
2.2 Caracterización de las propiedades ópticas.....	40
2.2.1 Óptica paraxial.....	41
2.2.2 Ecuaciones relativistas. Descripción matricial de la trayectoria.....	47
2.2.3 Aberraciones geométricas.....	49
2.2.3.1 Aberraciones producidas por la apertura.....	51
2.2.3.2 Aberraciones de campo.....	53
2.2.3.3 Cálculo de los coeficientes de aberración. Método de trayectorias....	54
2.3 Lente de dos cilindros: comparación entre las aproximaciones analítica y numérica.....	58
2.4 Diseño optimizado de una lente <i>einzel</i> de tres cilindros.....	65
2.4.1 Diseño del sistema y conexión con el modelo de Dymnikov.....	67
2.4.2 Optimización mediante el modelado del haz.....	69
2.5 Diseño optimizado de una lente aceleradora a 150 kV.....	75
2.5.1 Diseño y conexión con el modelo de Dymnikov.....	77
2.6 Bibliografía.....	81

Capítulo 3

Síntesis optimizada de lentes electrostáticas cuadrupolares

3.1 Introducción.....	87
------------------------------	-----------

3.2 Modelo de un sistema cuadrupolar.....	89
3.2.1 Modelo analítico del potencial y del campo.....	89
3.2.1.1 Efectos de borde.....	92
3.2.1.2 Valores del gradiente transversal.....	94
3.2.1.3 Longitud equivalente del campo.....	94
3.2.2 Determinación numérica de los parámetros de un cuadrupolo.....	96
3.3 El cuádruplete electrostático.....	101
3.3.1 Descripción del cuádruplete tipo Dymnikov.....	102
3.3.2 Síntesis optimizada del cuádruplete tipo Dymnikov.....	102
3.4 Análisis de la influencia de la dispersión en energía del haz.....	113
3.5 Análisis de la influencia de los defectos mecánicos.....	117
3.6 Bibliografía.....	120

Conclusiones finales

Aportaciones más relevantes.....	125
Futuros desarrollos.....	129

Apéndice

A1. El modelo de Dymnikov.....	133
A2. Extensión del método numérico al estudio de otras configuraciones cuadrupolares.....	135
A3. Códigos de simulación.....	140
A4. Bibliografía.....	142

Publicaciones

Publicaciones a que ha dado lugar esta tesis.....	145
Comunicaciones en congresos.....	146

Agradecimientos

Este trabajo no habría sido posible sin las valiosas aportaciones de muchas personas a las que quiero expresar mi más sincero agradecimiento.

A mi directora de tesis Dra. Dña. Genoveva Martínez Lopez, por su muy importante labor de dirección, porque ha puesto su experiencia y su tiempo a mi disposición, y porque en definitiva ha hecho posible la realización de esta tesis. Al Profesor Alexander D. Dymnikov, de cuyas investigaciones derivan las llevadas a cabo en esta memoria, y de quien hemos recibido siempre la mayor ayuda, tanto en la iniciación como en el desarrollo del presente trabajo.

Asimismo, quiero dar las gracias al Prof. Dr. D. Miguel Sancho, a la Prof^a. Dra. Dña. Margarita Llamas, al Dr. D. Vicente. J. G. Herrera y al doctorando D. Carlos Pérez Vidal por toda la ayuda que me han brindado y por los buenos momentos que hemos compartido en el laboratorio.

A todos los miembros de los grupos de microondas y colisiones atómicas del Dpto. de Física Aplicada III por atender tan amablemente mis consultas.

Al Dpto. de Física Aplicada III, por el constante apoyo recibido de todos sus miembros.

Al Dr. D. Gustavo García Gómez-Tejedor, investigador del CIEMAT, por su inestimable colaboración en el diseño del acelerador de electrones.

Al Centro de Proceso de Datos de la Universidad Complutense de Madrid y al Centro de Proceso de Datos del CIEMAT por las facilidades e indicaciones recibidas para la ejecución de los numerosos cálculos que han sido necesarios para la realización de esta tesis.

A mis padres y hermanos porque han tenido que soportar mis humores no siempre buenos, a pesar de lo cual, siempre han sabido comprenderme y animarme. A mi hermano Otman por el apoyo brindado en todos los aspectos.

Finalmente, existe un gran número de personas: familiares, amigos, etc. Quiero que quede constancia de mi reconocimiento por la ayuda y la colaboración de todo tipo, que he recibido de ellas.

Planteamiento e interés de la tesis

El diseño y construcción de sistemas de enfoque de iones a energías de MeV constituye uno de los retos más importantes en el área de la Óptica de Partículas Cargadas. Su creciente perfeccionamiento y utilización como microsondas en experimentos de litografía de haces iones, microelectrónica, microirradiación de células, determinación de trazas en minerales, etc., hacen de estos sistemas una herramienta única, preferida por sus cualidades frente a otras técnicas.

A su llegada a nuestro laboratorio, el Profesor Alexander Dymnikov nos propuso extender sus diseños para sistemas de enfoque magnético al caso electrostático. Su experiencia venía avalada por más de 30 instalaciones en laboratorios de todo el mundo, siendo uno de los pioneros a la vez que una gran autoridad en este campo.

El problema conectaba muy bien con las investigaciones de nuestro grupo. Desde hace años, se venían desarrollando cálculos para la determinación numérica de las distribuciones de potencial en lentes electrostáticas y posterior caracterización de los parámetros ópticos. El trabajo consistiría en adaptar dichas técnicas al estudio de la nueva lente, incluyendo una etapa de optimización. La exigencia de un alto grado de precisión en los resultados nos llevó incluso a buscar métodos más refinados, como por ejemplo los algoritmos para la integración de trayectorias. Asimismo, vimos la posibilidad de ampliar la optimización en los diseños para el caso de haces de iones y electrones con energías en el rango de los keV.

Uno de los análisis más interesantes de este trabajo consiste en ver la influencia que el modelado del haz antes de entrar al sistema de enfoque tiene sobre la imagen final. Esto se hace colocando dos aperturas que configuran el tamaño del objeto y la fracción del haz que se selecciona para ser enfocado. Nuestros resultados indican que una elección adecuada del tamaño de estas aperturas y la separación entre las mismas

permite minimizar el efecto de las aberraciones geométricas, corroborando las previsiones del modelo de Dymnikov y suministrando, además, datos precisos sobre la geometría y polarización de los electrodos que configuran el sistema.

Objetivos y organización

El objetivo de esta tesis es desarrollar un conjunto de algoritmos que, haciendo uso de técnicas numéricas suficientemente precisas, permitan efectuar la síntesis optimizada de sistemas de enfoque electrostático a energías relativamente bajas.

El primer capítulo describe cómo se ha desarrollado una versión del método de elementos de contorno que permite el cálculo de la distribución de campos eléctricos en sistemas cuadrupolares, comprobándose a través de numerosos tests su alto grado de precisión. A continuación se hace un estudio comparativo con el fin de elegir el algoritmo más apropiado para la integración de trayectorias en dichos campos.

El objetivo del segundo capítulo es ilustrar el proceso de optimización aplicándolo a lentes cilíndricas. Se analiza cómo efectuar la conexión entre el modelo aproximado de Dymnikov para estas lentes y nuestra simulación numérica. Todo ello se plasma en la síntesis de una lente *einzel* de 3 cilindros. Asimismo, se muestra la utilización conjunta de ambos métodos para el diseño de un acelerador de electrones a 150 keV y con un alto poder de enfoque. Para dicho estudio se ha necesitado un tratamiento relativista al integrar las trayectorias. Esta lente se puede adaptar con leves modificaciones en las polarizaciones al caso de aceleración y enfoque de protones.

El tercer capítulo se centra en la caracterización de sistemas cuadrupolares. Se analiza en detalle la influencia de la geometría de los electrodos sobre los principales parámetros de un cuadrupolo y cómo relacionar los resultados numéricos con los que suministra el modelo de Dymnikov. Siguiendo el mismo procedimiento que el capítulo

anterior, se realiza la síntesis de un cuádruplete electrostático capaz de disminuir el tamaño de un objeto en una cantidad comparable a la de sus homólogos magnéticos, y diseñado de forma que las aberraciones de tercer orden están minimizadas para distintos puntos de trabajo en función de la emitancia. Para completar el estudio, se muestra la forma en que las aberraciones cromática y mecánica pueden deteriorar la calidad de la imagen a fin de establecer las tolerancias adecuadas.

El trabajo finaliza con un resumen de las aportaciones más destacadas y de las posibles líneas de aplicación a seguir en el futuro.

Capítulo 1

TÉCNICAS NUMÉRICAS PARA EL ESTUDIO DE LENTES ELECTROSTÁTICAS

1.1 Introducción

El estudio de las propiedades ópticas de un sistema electrostático requiere la solución de dos problemas básicos. El primero es el cálculo de las distribuciones del potencial y del campo en la región de interés; ello implica la resolución de la ecuación de Poisson o de Laplace correspondiente, sujeta a las condiciones de contorno impuestas por la geometría del problema. El segundo es efectuar el cálculo de las trayectorias de las partículas cargadas sometidas a la acción de dicho campo y determinar los parámetros que caracterizan su comportamiento desde el punto de vista de la óptica electrónica.

Existen muy pocas geometrías para las cuales se pueda utilizar una solución analítica del potencial [1,2,3]. Por ello, hay que recurrir a la utilización de técnicas numéricas que resuelvan el problema de forma aproximada. Otro tanto se puede decir de la integración de la ecuación de fuerza. Afortunadamente, disponemos de una variedad de métodos que, programados de manera adecuada, nos pueden proporcionar resultados con una precisión suficiente para nuestros propósitos.

En este capítulo estudiaremos los métodos numéricos que se han utilizado en el diseño de las lentes. Para determinar los campos hemos elegido el Método de Elementos de Contorno (*Boundary Element Method*), por su capacidad de ser aplicable a cualquier tipo de geometría y por ser especialmente adecuado para el cálculo directo de las trayectorias [4,5]. Como aplicación práctica se ha realizado el estudio detallado de un sistema de conductores de interés para nuestro trabajo: el cuadrupolo electrostático. Se analiza la forma de determinar los parámetros que intervienen en el cálculo de las densidades de carga sobre los electrodos y del potencial en cualquier punto del espacio mediante superposición.

Para la obtención de trayectorias de partículas cargadas existen diversos métodos de integración, tales como los métodos mono-etapa y multi-etapa. Si se quiere utilizarlos correctamente es necesario tener en cuenta su estabilidad, precisión y eficiencia. En la segunda parte de este capítulo vamos a explicar brevemente los esquemas de los métodos de integración que hemos desarrollado, indicando en cada uno de ellos sus ventajas e inconvenientes.

1.2 Solución numérica del problema electrostático

Todos los métodos numéricos como diferencias finitas, elementos finitos, elementos de contorno, etc., presentan ventajas y desventajas entre sí, y la elección de uno u otro dependerá del tipo de problema que queramos resolver. El método más adecuado para nuestros fines es el método de elementos de contorno. Entre las ventajas que presenta está la de ser aplicable a cualquier tipo de geometría y admitir la posibilidad de tratar problemas en los que el contorno no esté totalmente cerrado, lo que supondría un serio inconveniente, por ejemplo, en un método de diferencias finitas. Una vez conocidas las densidades de carga en el contorno, se puede obtener el potencial y el campo en cualquier punto que interese mediante superposición; esta particularidad será de enorme importancia cuando tengamos que determinar numéricamente la trayectoria de una partícula sometida a la acción de un campo electrostático; es tal vez en este aspecto, y para nuestro objetivo concreto, donde aparece más marcada la superioridad del método de elementos de contorno frente a otros métodos numéricos. En el cálculo de los coeficientes de la matriz resultante —y del potencial en un punto cualquiera— aparecen expresiones muy complejas y, en general, es preciso recurrir a la integración numérica; el tiempo de computación será grande y puede quedar en desventaja frente a

otros métodos. Sin embargo, la posibilidad de utilizar ordenadores cada vez más rápidos minimiza este inconveniente.

1.2.1 Método de Elementos de Contorno

El objetivo de este método es realizar la transformación de una ecuación funcional a una ecuación matricial utilizando algunas aproximaciones, y resolver el sistema resultante por los procedimientos usuales [4]. La forma más apropiada de presentar el estudio es por medio de la teoría de espacios y operadores lineales que supondremos conocida.

Consideremos una ecuación funcional no homogénea del tipo:

$$L(f) = g \quad (1.1)$$

donde L es un operador lineal, f la función incógnita que deberá pertenecer al dominio de L , y g una función conocida del rango de L .

Supondremos que f puede expresarse como una serie de funciones del dominio de L :

$$f = \sum_n \alpha_n f_n \quad (1.2)$$

donde los coeficientes α_n son constantes. A las funciones f_n las llamaremos funciones base. Para una solución exacta la suma dada en la expresión anterior debe extenderse en general hasta infinito, si bien, para una solución aproximada será suficiente considerar un conjunto finito de funciones base.

Necesitamos definir un producto escalar entre funciones, $\langle f, g \rangle$, que cumpla las siguientes condiciones:

$$a) \quad \langle f, g \rangle = \langle g, f \rangle$$

$$b) \quad \langle \alpha f + \beta g, h \rangle = \alpha \langle f, h \rangle + \beta \langle g, h \rangle \quad (1.3)$$

$$c) \quad \langle f^*, f \rangle = \begin{cases} > 0 & \text{si } f \neq 0 \\ = 0 & \text{si } f = 0 \end{cases}$$

donde α y β son escalares, y donde (*) indica conjugación compleja.

Sustituimos (1.2) en (1.1) y, teniendo en cuenta que el operador L es lineal, obtenemos:

$$\sum_n \alpha_n L(f_n) = g \quad (1.4)$$

Definamos ahora un conjunto de funciones peso o de prueba, w_1, w_2, \dots en el dominio de L , y multipliquemos escalarmente los dos miembros de la ecuación (1.4) por cada función w_m . Se tendrá entonces como resultado:

$$\sum_n \alpha_n \langle w_m, L(f_n) \rangle = \langle w_m, g \rangle \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (1.5)$$

y este conjunto de ecuaciones algebraicas puede escribirse de forma matricial como:

$$[l_{mn}][\alpha_n] = [g_m] \quad (1.6)$$

donde

$$[l_{mn}] = \begin{bmatrix} \langle w_1, Lf_1 \rangle & \dots & \langle w_1, Lf_n \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle w_m, Lf_1 \rangle & \dots & \langle w_m, Lf_n \rangle \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

$$[\alpha_n] = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} \quad [g_m] = \begin{bmatrix} \langle w_1, g \rangle \\ \vdots \\ \langle w_m, g \rangle \end{bmatrix} \quad (1.8)$$

si la matriz $[l_{mn}]$ es no singular, los coeficientes α_n se obtienen efectuando la multiplicación de los dos miembros de (1.6) por la matriz inversa.

$$[\alpha_n] = [l_{mn}]^{-1} [g_m] \quad (1.9)$$

Una vez conocidos los coeficientes α_n podemos calcular f mediante la ecuación (1.2). Para que la función f sea una solución exacta, las f_n deben constituir un conjunto completo; en la práctica solo se utilizan un cierto número de ellas obteniendo soluciones más o menos aproximadas. Uno de los aspectos más importantes a la hora de aplicar este método es la elección apropiada de las funciones base y de las funciones de prueba; entre los factores a tener cuenta figurarán el grado de precisión exigido, facilidad de cálculo de los elementos de matriz $[l_{mn}]$, etc. Las f_n deben ser linealmente independientes y escogerse de forma que su superposición represente a f razonablemente bien. Las w_m deben ser también linealmente independientes y su elección se hará de forma que los productos $\langle w_m, g \rangle$ sean relativamente independientes de las propiedades de g .

Una forma sencilla de obtener soluciones aproximadas es imponer que la ecuación (1.4) sea satisfecha en un conjunto de puntos discretos. Esta técnica se denomina acoplo puntual (*point-matching*) y es equivalente a utilizar funciones delta de Dirac como funciones de prueba. Por otra parte se puede usar funciones base f_n definidas de forma que, en lugar de existir en todo el dominio de L , existen solo en subsecciones del mismo. Entonces cada α_n del desarrollo de la ecuación (1.3) afecta a la aproximación de f únicamente sobre una subsección de la región en estudio. Esta aproximación simplifica el cálculo de $[l_{mn}]$ y suele emplearse conjuntamente con la anterior. Otra elección que se utiliza con frecuencia es tomar $f_n = w_n$, conocida como método de Galerkin.

1.2.2 Aplicación al problema del cuadrupolo electrostático

En el trabajo que presentamos en los capítulos siguientes trataremos con dos tipos de geometrías: sistemas con simetría de rotación y sistemas cuadrupolares. Con respecto al primer tipo, a lo largo de varios años se ha desarrollado en nuestro grupo de investigación un estudio muy detallado acerca de los aspectos computacionales y sus posibles aplicaciones en Óptica electrónica y Biofísica [6,7,8]. El cálculo de los coeficientes de la matriz $[I_{mn}]$ puede encontrarse en estas referencias, particularmente en [7]. Nosotros hemos adaptado el método al análisis del segundo tipo. Se trata de un sistema que consta de cuatro cilindros conductores, de espesor despreciable, de radio r_c y de longitud l_c , situados paralelamente al eje Oz y que forman entre sí una cruz; la apertura del conjunto se representa por la distancia a entre el eje Oz y la superficie lateral de cada cilindro; véase la Figura 1.1. Los electrodos se polarizan al potencial $\pm V$, alternativamente.

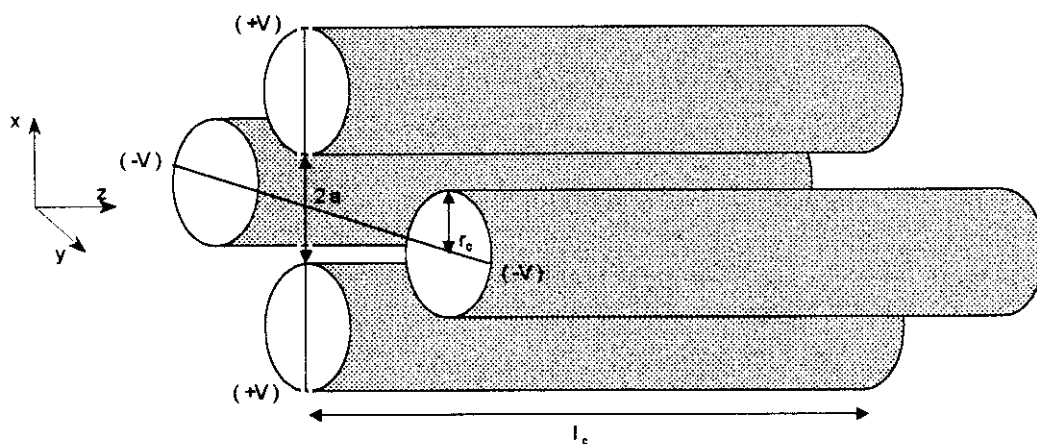


Figura 1.1 Vista en perspectiva del sistema que sirve de base a nuestro modelo indicando las polarizaciones sobre cada cilindro.

La aplicación del método propuesto nos lleva a realizar las siguientes etapas hasta completar la resolución del problema electrostático.

- a) División de la geometría en un número adecuado de subsecciones.
- b) Obtención de los elementos de la matriz y determinación de las densidades de carga sobre los cilindros.
- c) Cálculo del potencial y del campo en el punto deseado.

Veamos en detalle cada uno de estos pasos.

1.2.2.1 Estrategia de la división de la geometría del sistema

En la mayoría de los métodos numéricos, la primera etapa consiste en discretizar toda o parte de la región en estudio. En nuestro caso hay que dividir en subáreas la superficie de los conductores; para ello fraccionamos cada cilindro en aros y a su vez cada aro en sectores. Suele ser conveniente una partición más fina en los bordes debido a que en las proximidades de los bordes de un conductor la carga varía más rápidamente que en las regiones alejadas de aquellos [9]. La partición se hace simétrica en cada cilindro de modo que se genera medio cilindro y la segunda mitad se obtiene por reflexión de la primera. Se coloca un número Nr_l de aros, cuya anchura está en progresión geométrica de razón R_l , y se toma una fracción F_l de la longitud total del cilindro que corresponderá a la anchura del primer aro; el resto se dividirá en elementos iguales hasta completar el número M_l de aros en medio cilindro; cada aro se subdivide en un número Ns_l de sectores, así que se generan $2 \times Ns_l \times M_l = N_l$ subsecciones en cada cilindro y $8 \times Ns_l \times M_l = N$ en el total del sistema. Dada la simetría del problema parece conveniente realizar la partición de un octavo del sistema y generar el resto por rotación o reflexión de este primer octavo; la división de la geometría se hace en un número de subsecciones suficiente, a fin de que sea razonable suponer que la densidad de carga sobre cada subsección es aproximadamente constante.

La numeración comienza en el borde de cada cilindro de tal forma que la primera subsección pertenece al cilindro con centro en el semieje Ox positivo, numerando sucesivamente todas las subsecciones del primer cilindro; luego pasaremos al segundo cuyo centro está situado en el semieje Oy negativo; después se numeran el tercero y el cuarto con centros en los semiejes Ox negativo y Oy positivo, respectivamente. En la Figura 1.2 se muestra este tipo de división y la numeración que utilizaremos en el sistema para el caso $N_{S_I} = 8$.

8	16	-----	N1-8	N1
7	15	-----	N1-9	N1-1
6	14	-----	N1-10	N1-2
5	13	-----	N1-11	N1-3
4	12	-----	N1-12	N1-4
3	11	-----	N1-13	N1-5
2	10	-----	N1-14	N1-6
1	9	-----	N1-15	N1-7
⋮				
3N1+2	3N1+10	-----	4N1-14	4N1-6
3N1+1	3N1+9	-----	4N1-15	4N1-7
3N1+8	3N1+16	-----	4N1-8	4N1
3N1+7	3N1+15	-----	4N1-9	4N1-1
3N1+6	3N1+14	-----	4N1-10	4N1-2
3N1+5	3N1+13	-----	4N1-11	4N1-3
3N1+4	3N1+12	-----	4N1-12	4N1-4
3N1+3	3N1+11	-----	4N1-13	4N1-5

Figura 1.2 *Orden de numeración de las subsecciones para discretizar el sistema.*

1.2.2.2 Determinación de los elementos de la matriz y las densidades de carga sobre los cilindros

Consideraremos en primer lugar el caso de un conductor conectado a un potencial V ; sobre su superficie habrá una densidad de carga $\sigma(\vec{r}')$. La ecuación integral para el

cálculo del potencial en cualquier punto creado por dicha distribución será

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_s \frac{\sigma(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} ds \quad (1.10)$$

en particular si el punto \vec{r} se encuentra sobre el conductor y suponiendo nulo el potencial a una distancia infinitamente alejada, se tendrá:

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_s \frac{\sigma(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} ds \quad \vec{r}_0 \in S \quad (1.11)$$

Usando la terminología del método de elementos de contorno, las variables de este problema se identifican de la siguiente manera:

$$f = \sigma(\vec{r}) \quad g = V$$

$$L(f) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_s \frac{f}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} ds$$

y entonces la ecuación (1.11) es formalmente igual a la (1.1)

Un producto interior adecuado para este problema es

$$\langle f, g \rangle = \int_s f(r) g(r) ds \quad (1.12)$$

como funciones base utilizamos las correspondientes a un método de subsecciones, definidas por

$$f_n = \begin{cases} 1 & \text{en } \Delta s_n \\ 0 & \text{en } \Delta s_m \neq \Delta s_n \end{cases} \quad (1.13)$$

siendo Δs_n ($n = 1, 2, \dots, N$) las distintas subsecciones en que se ha dividido la superficie del conductor. Podemos expresar entonces la densidad de carga como

$$\sigma(\vec{r}) \approx \sum_{j=1}^N \alpha_j f_j \quad (1.14)$$

Otro aspecto importante es la elección de las funciones de prueba; llamando \vec{r}_{mi} al vector que define el punto medio de Δs_i , definimos las funciones w_i de forma que

$$w_i = \delta(\vec{r} - \vec{r}_{mi}) \quad (1.15)$$

se trata, pues, de funciones delta de Dirac. Esta elección es equivalente a hacer una aproximación de acoplo puntual en la resolución del problema. Los coeficientes de la matriz (1.7) se reducen a la expresión

$$l_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\Delta s_j} \frac{ds_j}{|\vec{r}_{mi} - \vec{r}_j|} \quad (1.16)$$

los elementos de $[g]$ son igual al valor del potencial aplicado

Esta formulación se generaliza fácilmente al conjunto de conductores que estamos analizando. Las integrales (1.10) y (1.11) se extienden ahora a las cuatro superficies cilíndricas y la matriz $[g]$ consta de los elementos

$$[g] = \begin{bmatrix} V \\ \vdots \\ -V \\ \vdots \\ V \\ \vdots \\ -V \\ \vdots \end{bmatrix} \left\{ \begin{array}{l} \text{polarización del 1}^{\text{er}} \text{ cilindro.} \\ \text{polarización del 2}^{\text{o}} \text{ cilindro.} \\ \text{polarización del 3}^{\text{er}} \text{ cilindro.} \\ \text{polarización del 4}^{\text{o}} \text{ cilindro.} \end{array} \right. \quad (1.17)$$

debido a las simetrías y antisimetrías del problema, es posible reducir el número de ecuaciones resultante en un factor de dieciséis. En efecto, definiendo los índices i y k en la forma

$$i = (r-1)Nsl + j \quad \text{y} \quad k = rNsl - j$$

donde

$$r = 1, 2, \dots, Ml \quad \text{y} \quad j = 1, 2, \dots, Nsl/2$$

se tienen las siguientes igualdades

$$\begin{aligned}
 \alpha_i &= \alpha_{k+1} = \alpha_{N_1-i+1} = \alpha_{N_1-k} = \\
 -\alpha_{N_1+i} &= -\alpha_{N_1+k+1} = -\alpha_{2N_1-i+1} = -\alpha_{2N_1-k} = \\
 \alpha_{2N_1+i} &= \alpha_{2N_1+k+1} = \alpha_{3N_1-i+1} = \alpha_{3N_1-k} = \\
 -\alpha_{3N_1+i} &= -\alpha_{3N_1+k+1} = -\alpha_{4N_1-i+1} = -\alpha_{4N_1-k}
 \end{aligned} \tag{1.18}$$

El uso de (1.18) permite trabajar con una matriz reducida a la dimensión $\frac{N_1}{4} \times \frac{N_1}{4}$, por lo cual se calcula únicamente una cuarta parte de las densidades de carga sobre un cilindro y el resto se generan según esta expresión; ello implica una gran economía en la memoria utilizada y en el tiempo de computación.

Para calcular los elementos de la matriz debe integrarse la ecuación (1.16); llamamos a x_{ck} e y_{ck} a las coordenadas de x e y , respectivamente, del centro del k -ésimo cilindro, y las definimos en la forma:

$$\begin{aligned}
 x_{ck} &= (2^k - k^2)(a + r_c) \\
 y_{ck} &= (2^{5-k} - (5-k)^2)(a + r_c)
 \end{aligned}$$

Para nuestra geometría, en la expresión de la distancia entre los puntos fuente y campo $|\vec{r}_{mi} - \vec{r}_j| = \sqrt{(x_{mi} - x_j)^2 + (y_{mi} - y_j)^2 + (z_{mi} - z_j)^2}$, es conveniente poner las variables x_j e y_j en función de φ_j ; entonces $ds_j = r_c d\varphi_j dz_j$; $x_j = x_{ck} + r_c \cos \varphi_j$ e $y_j = y_{ck} - r_c \sin \varphi_j$, y la ecuación (1.16) será:

$$l_{ij} = C \int_{\varphi_{j1}}^{\varphi_{j2}} \left[\int_{z_{j1}}^{z_{j2}} \frac{r_c dz_j}{\sqrt{D(\varphi_j) + (z_j - z_{mi})^2}} \right] d\varphi_j \tag{1.19}$$

donde $C = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ y $D(\varphi_j) = (x_{ck} + r_c \cos \varphi_j - x_{mi})^2 + (y_{ck} - r_c \sin \varphi_j - y_{mi})^2$ con φ_{j1} y

φ_{j2} definiendo los extremos angulares y z_{j1}, z_{j2} los extremos axiales de la superficie

cilíndrica que forma ΔS_j . La ecuación (1.19) no podrá integrarse analíticamente en las dos variables y será preciso recurrir a la integración numérica. Primero realizamos una integración analítica en la variable z_j , obteniendo la siguiente expresión.

$$l_{ij} = r_c C \int_{\varphi_{j1}}^{\varphi_{j2}} \text{Log} \frac{\sqrt{D(\varphi_j) + (z_{j2} - z_{mi})^2 + (z_{j2} - z_{mi})}}{\sqrt{D(\varphi_j) + (z_{j1} - z_{mi})^2 + (z_{j1} - z_{mi})}} d\varphi_j \quad (1.20)$$

La integración numérica de la ecuación (1.20) se efectúa mediante la regla de Simpson [10]. Para los elementos en los que al integrar intervengan las coordenadas del punto medio de la subárea j , de forma que $x_{mi} - x_{mj} = 0$ e $y_{mi} - y_{mj} = 0$, la función $D(\varphi_j) = 0$, y puede ocurrir que el denominador de (1.20) se anule. Es por tanto necesario programar la regla de los tres octavos ya que utiliza un número de intervalos múltiplo de tres y se evita dicha posibilidad. En los restantes casos, se emplea la regla de Simpson con coeficiente un tercio, que tiene un término de error más pequeño.

Una vez determinados los elementos de la matriz l_{ij} , el paso siguiente es resolver el sistema matricial de la ecuación (1.9); para ello, hemos utilizado un método de eliminación de Gauss [10]. De acuerdo con la expresión (1.14) podemos obtener la distribución aproximada de las densidades de carga sobre las superficies de los cilindros; conocidas esas densidades estamos en condiciones de calcular el potencial y el campo eléctrico en cualquier punto del espacio.

1.2.3 Optimización de la solución numérica

Vamos a particularizar el método descrito en las secciones anteriores a nuestro sistema, detallando el proceso de optimización llevado a cabo. En la Figura 1.1 hemos fijado la longitud de los cilindros $l_c = 7 \text{ cm}$, el radio $r_c = 0.5 \text{ cm}$, y la apertura

$a = 0.575\text{cm}$; hemos dividido cada cilindro en $2 \times M_I = 26$ aros y a su vez cada aro en N_{s_I} (variable) sectores que formen subsecciones donde tendremos que calcular las densidades de carga; es sabido que para un mismo número de subsecciones es mucho más precisa la distribución que se obtiene con una división no uniforme de la geometría; nosotros hemos dividido los aros en progresión geométrica al aproximarse a los bordes con razón $R_I = 2$ y una fracción $F_I = 0.001$ de la longitud total del cilindro. Se han realizado varios refinamientos en el cálculo de los coeficientes de la matriz, y como prueba se ha computado el potencial sobre los conductores (donde sabemos que su valor debe coincidir con el potencial aplicado). En la Figura 1.3 se muestra que el error relativo en los bordes disminuye al poner mayor número N_{r_I} de aros no uniformes. Nosotros hemos elegido $N_{r_I} = 8$ en nuestra simulación por haber obtenido un menor error relativo. Se ha realizado un segundo estudio variando el número de sectores. En la Figura 1.4 se muestra que el error relativo disminuye al aumentar dicho número. Se observa en las dos figuras anteriores que el error a lo largo del eje Oz permanece constante en la zona central y oscila bastante al aproximarse a los bordes; esas oscilaciones son debidas a la división más fina de las subsecciones en esa región, donde las densidades de carga varían rápidamente y la computación de los valores numéricos son más sensibles a los errores al efectuarse divisiones por números pequeños; en consecuencia, los bordes deben ser áreas con errores más altos. Por último se ha hecho un análisis en la zona central del sistema; esta vez hemos fijado una posición en el eje Oz , y para diferentes sectores hemos variado el ángulo alrededor del eje del cilindro; hemos barrido solamente la mitad del ángulo 2π ya que la otra mitad es simétrica y tiene el mismo comportamiento. En la Figura 1.5 se muestra cómo varía el error relativo en diferentes posiciones angulares y para diferente número de sectores; notemos que el error relativo es prácticamente nulo en el centro de cada sector ya que ese punto es

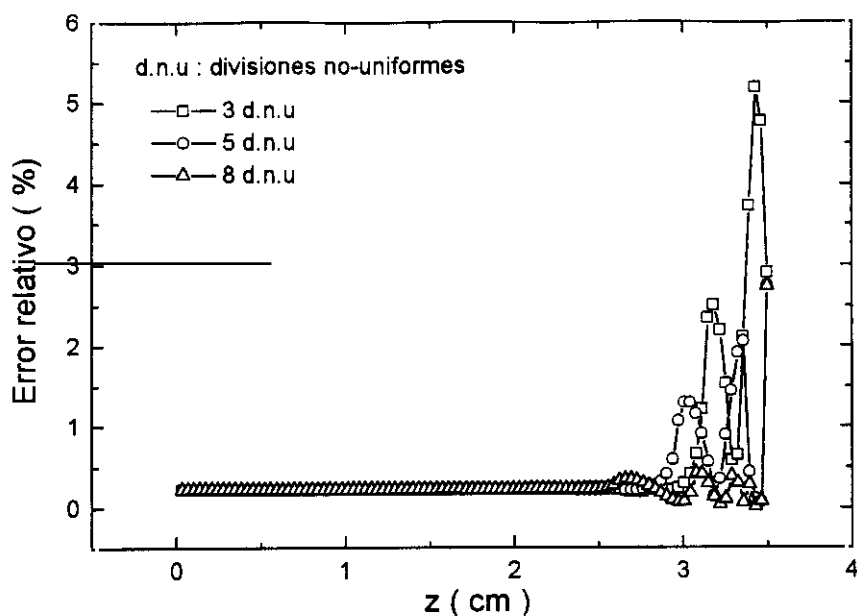


Figura 1.3 Error relativo del potencial sobre uno de los conductores con diferentes divisiones no uniformes en los bordes; se muestra solamente la mitad, el resto tiene la misma figura de error por simetría. $\varphi = 2.79$ rad.

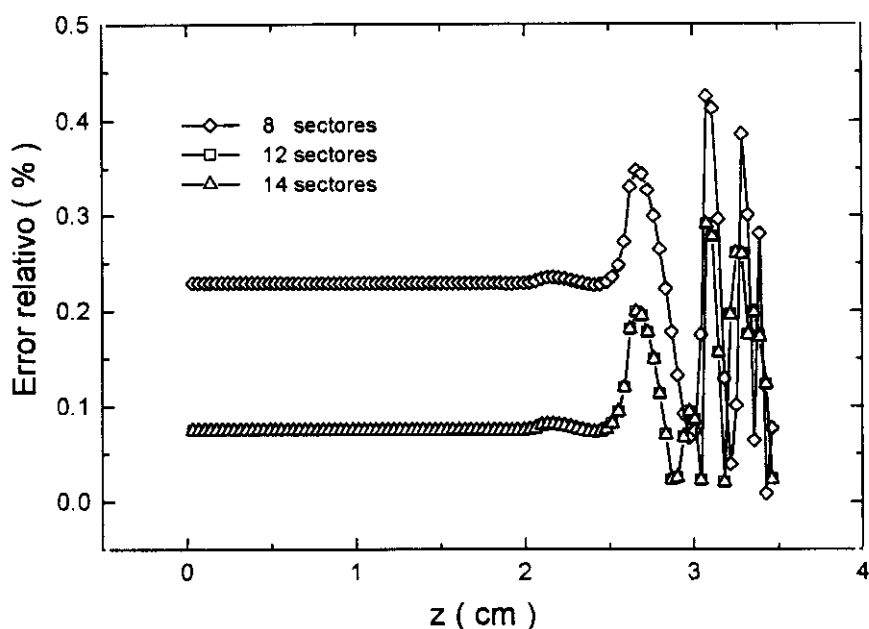


Figura 1.4 Error relativo del potencial sobre la mitad de uno de los conductores con diferente número de sectores. Para 8 sectores, $\varphi = 2.79$ rad; para 12 y 14 sectores, $\varphi = 2.96$ rad.

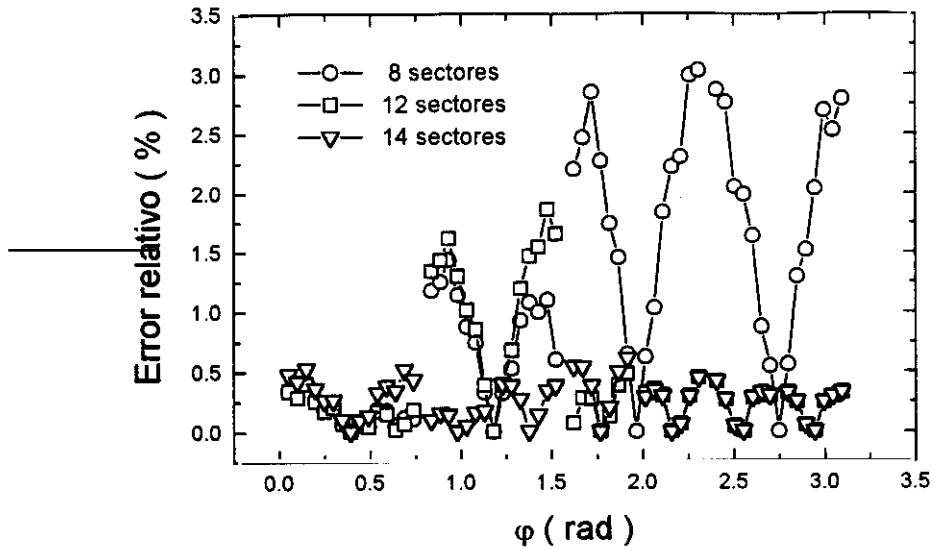


Figura 1.5 *Error relativo del potencial sobre uno de los conductores en la zona central, en función del número de sectores.*

solución del sistema de ecuaciones (1.6). El error crece al acercarse a los extremos de los sectores; también se ve claramente que el error disminuye al aumentar el número de sectores.

A la hora de calcular las componentes del campo eléctrico hemos realizado otra discretización; una división de las subsecciones en pequeñas subáreas nos permite el uso de la aproximación de carga puntual sin una pérdida perceptible de precisión; así, hemos comprobado que dividiendo cada subsección en al menos en 20 subáreas se obtiene un comportamiento adecuado. Se ha realizado un estudio comparativo de la derivada primera de las componentes del campo eléctrico en una serie de puntos próximos al eje Oz , situados en el centro del cuadrupolo y en una zona muy cercana al borde del mismo. Se ha hecho una variación sistemática en el número de sectores. Para calcular la derivada hemos usado la expresión en segundas diferencias centrales que se puede obtener del desarrollo en serie de Taylor.

$$y'_i = \frac{-y_{i+2} + 8y_{i+1} - 8y_{i-1} + y_{i-2}}{12(\Delta x)} \quad (1.21)$$

En un cuadrupolo ideal [11], la derivada primera de la componente E_x es constante y de signo contrario a la de E_y , $\frac{\partial E_x}{\partial x} = -\frac{\partial E_y}{\partial y} = cte$; además, la divergencia del campo es igual a cero, es decir $\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0$, ya que se supone que no hay carga volúmica. En las Tablas 1.1 y 1.2 se muestra que en el centro del cuadrupolo las derivadas primeras de las componentes del campo verifican las condiciones mencionadas en diversos puntos, y los resultados se mejoran en general cuando trabajamos con un número mayor de sectores. En la zona próxima al borde deja de ser cierta la hipótesis de cuadrupolo ideal, pero debe seguir siendo nula la divergencia. Es la región en la que presumiblemente los resultados son más imprecisos.

Del análisis de las figuras y de las tablas se desprende que el error relativo disminuye al aumentar el número de subsecciones, sin embargo en sistemas más complejos habrá que tener en cuenta que se pueden sumar errores de redondeo por aumentar considerablemente el número de operaciones y en consecuencia habrá que trabajar con el menor número posible de ellas; nosotros hemos usado $NsI = 14$ en toda la simulación al considerarlo como óptimo y por lo tanto el número de las subsecciones en el total del sistema será $N = 1456$.

Después de determinar los parámetros óptimos de la división de la geometría, vamos analizar la influencia del radio de los cilindros en el error de la solución obtenida anteriormente. Para ello hemos elegido en la zona central la subsección más próxima al eje del sistema, y para los distintos radios hemos calculado el error relativo en diversas posiciones angulares.

φ (rad)	$\frac{\partial E_x}{\partial x} (\text{Vm}^{-2})$	$\frac{\partial E_y}{\partial y} (\text{Vm}^{-2})$	$\frac{\partial E_z}{\partial z} (\text{Vm}^{-2})$	$\Sigma (\text{Vm}^{-2})$
0	-60231.5	60231.5	-2.763×10^{-3}	5.708×10^{-7}
	-59390.2	59390.2	-2.558×10^{-3}	-1.147×10^{-7}
	-59392.4	59392.5	-2.549×10^{-3}	-1.445×10^{-7}
0.393	-60204.7	60204.7	-1.953×10^{-3}	4.102×10^{-7}
	-59371.5	59371.5	-1.808×10^{-3}	-1.098×10^{-7}
	-59373.8	59373.8	-1.802×10^{-3}	-1.154×10^{-7}
0.785	-60178.0	60178.0	1.342×10^{-10}	-4.285×10^{-9}
	-59352.8	59352.8	-1.343×10^{-10}	1.921×10^{-9}
	-59355.1	59355.1	7.814×10^{-10}	-1.804×10^{-9}
1.178	-60204.7	60204.7	1.953×10^{-3}	-4.119×10^{-7}
	-59371.5	59371.5	1.808×10^{-3}	1.121×10^{-7}
	-59373.8	59373.8	1.802×10^{-3}	1.070×10^{-7}
1.571	-60231.5	60231.5	2.763×10^{-3}	-5.488×10^{-7}
	-59390.2	59390.2	2.558×10^{-3}	1.380×10^{-7}
	-59392.5	59392.5	2.549×10^{-3}	1.520×10^{-7}

Tabla 1.1 Derivadas primeras de las componentes del campo eléctrico en el centro del sistema a 10^{-3} m del eje Oz, obtenidas mediante segundas diferencias centrales; $l_c = 7\text{cm}$, $r_c = 0.5\text{cm}$; $a = 0.575\text{cm}$; $\Sigma = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z}$. Valores superiores: $Ns1 = 8$; valores centrales: $Ns1 = 12$; valores inferiores: $Ns1 = 14$. Todos los resultados corresponden a $V = 1$ voltio.

$\varphi \text{ (rad)}$	$\frac{\partial E_x}{\partial x} (\text{Vm}^{-2})$	$\frac{\partial E_y}{\partial y} (\text{Vm}^{-2})$	$\frac{\partial E_z}{\partial z} (\text{Vm}^{-2})$	$\Sigma (\text{Vm}^{-2})$
0	-59699.5	59504.8	194.732	-8.448×10^{-5}
	-58892.5	58703.0	189.460	-9.755×10^{-5}
	-58895.2	58705.7	189.466	-9.753×10^{-5}
0.393	-59643.6	59505.8	137.733	-5.974×10^{-5}
	-58845.1	58711.1	134.010	-6.895×10^{-5}
	-58847.8	58713.8	134.013	-6.895×10^{-5}
0.785	-59547.3	59547.3	-6.516×10^{-10}	-1.506×10^{-9}
	-58758.5	58758.5	1.684×10^{-9}	1.077×10^{-8}
	-58761.2	58761.2	-9.145×10^{-10}	-8.586×10^{-10}
1.178	-59505.8	59643.6	-137.733	5.974×10^{-5}
	-58711.1	58845.1	-134.010	6.895×10^{-5}
	-58713.8	58847.8	-134.013	6.896×10^{-5}
1.571	-59504.8	59699.5	-194.732	8.447×10^{-5}
	-58703.0	58892.5	-189.460	9.754×10^{-5}
	-58705.7	58895.2	-189.466	9.753×10^{-5}

Tabla 1.2 Derivadas primeras de las componentes del campo eléctrico en el extremo del sistema a 10^{-3} m del eje Oz, obtenidas mediante segundas diferencias centrales; $l_c = 7\text{cm}$, $r_c = 0.5\text{cm}$; $a = 0.575\text{cm}$; $\Sigma = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z}$. Valores superiores: $Ns1 = 8$; valores centrales: $Ns1 = 12$; valores inferiores: $Ns1 = 14$. Todos los resultados corresponden a $V = 1 \text{ voltio}$.

En la Figura 1.6, se observa que para una apertura $a = 0.575 \text{ cm}$, el error relativo crece al aumentar el radio de los cilindros. Así que los resultados son más precisos al trabajar con radios relativamente pequeños; en caso de ser necesario utilizar radios grandes, es recomendable aumentar el número de subsecciones.

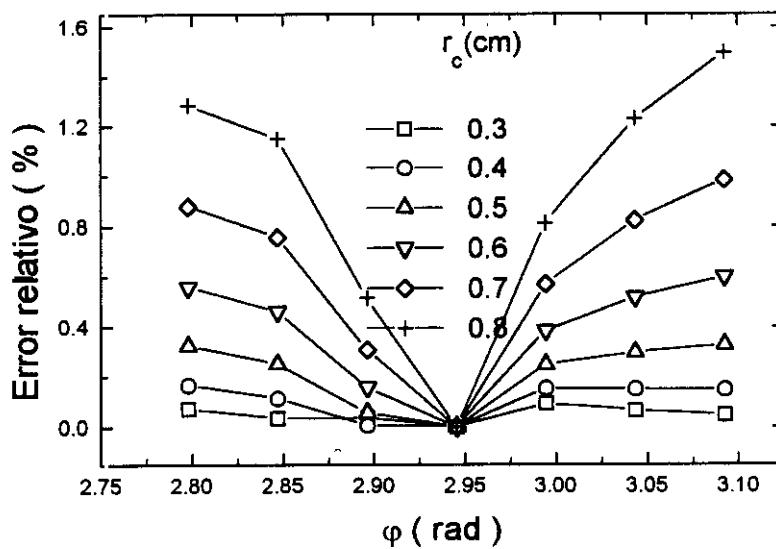


Figura 1.6 Error relativo del potencial en la zona central sobre una subsección con diferentes radios del cilindro.

Quedan pues ilustradas con este análisis, la potencia y flexibilidad del método de elementos de contorno para la solución numérica del problema de conductores que hemos planteado. Más adelante comprobaremos que aún relajando las condiciones de simetría, el método sigue proporcionando soluciones con una precisión aceptable y será muy útil para el estudio de aberraciones mecánicas en lentes cuadrupolares.

1.3 Solución numérica del problema de la integración de trayectorias

El comportamiento de muchos procesos físicos puede representarse por medio de ecuaciones diferenciales ordinarias, sujetas a determinadas condiciones iniciales. Los métodos de solución de estas ecuaciones son por tanto de gran importancia para los científicos. Aunque se conoce la solución analítica de muchas ecuaciones diferenciales importantes, un número todavía mayor de ellas no puede ser resuelto analíticamente. Afortunadamente es posible, en general, encontrar la solución numérica de estas últimas. En esta sección estudiaremos dos grupos de métodos numéricos, clasificados como mono-etapa y multi-etapa, particularizados a la solución del problema de la integración de trayectorias de las partículas cargadas bajo la acción de campos estáticos.

1.3.1 Ecuaciones de las trayectorias

Consideremos una partícula que describe la trayectoria $\vec{r}(t)$, con velocidad $\vec{v}(t)$, a través una región donde se establecen los campos electrostático $\vec{E}(\vec{r})$, y magnetostático $\vec{B}(\vec{r})$. En primer lugar presentamos un estudio general de las ecuaciones relativistas de movimiento y las desarrollamos particularizadas a un sistema de coordenadas cartesianas. Para estos campos tenemos la ecuación de fuerza de Lorentz:

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = e \left[\vec{E}(\vec{r}) + \vec{v}(t) \times \vec{B}(\vec{r}) \right] \quad (1.22)$$

$$\vec{p} = m_0 \vec{v} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-1/2} = \gamma m_0 \vec{v} \quad (1.23)$$

donde \vec{p} es el momento lineal de la partícula, m_0 su masa en reposo, e su carga eléctrica y c la velocidad de la luz.

Definimos el vector $\vec{Y}(t)$ con componentes:

$$\begin{aligned} Y_1(t) &= x(t) & Y_3(t) &= y(t) & Y_5(t) &= z(t) \\ Y_2(t) &= p_x(t) & Y_4(t) &= p_y(t) & Y_6(t) &= p_z(t) \end{aligned} \quad (1.24)$$

Entonces las ecuaciones de movimiento pueden escribirse como:

$$\frac{d\vec{Y}(t)}{dt} = \vec{g}(\vec{Y}) \quad (1.25)$$

donde las componentes de la función vector \vec{g} son:

$$g_1(\vec{Y}) = \frac{1}{m_0} Y_2 \left(1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2} \right)^{-1/2} \quad (1.26)$$

$$g_2(\vec{Y}) = e \{ E_x + g_3(\vec{Y}) B_z - g_5(\vec{Y}) B_y \} \quad (1.27)$$

y se hace lo mismo para ecuaciones de $g_3 - g_6$ mediante un cambio cíclico en los índices.

A partir de las ecuaciones anteriores es posible deducir la ley de la conservación de energía. Cuando la integración se realiza entre dos puntos a potenciales V_1 y V_2 con respecto al potencial en el que la partícula se encuentra en reposo, tenemos

$$(\gamma_2 - \gamma_1) m_0 c^2 = e(V_1 - V_2) \quad (1.28)$$

En el caso que sólo exista un campo electrostático podemos transformar las ecuaciones (1.25) en un conjunto particularmente adecuado a nuestros cálculos posteriores. Su deducción puede verse en [12]; aquí solo daremos los resultados finales. Para un sistema en el que la trayectoria se integra a lo largo de la dirección Oz se definen las variables:

$$x' = \frac{dx}{dz} \quad ; \quad y' = \frac{dy}{dz} \quad ; \quad x'' = \frac{d^2x}{dz^2} \quad ; \quad y'' = \frac{d^2y}{dz^2} \quad (1.29)$$

Dados la energía en reposo de la partícula $W_0 = m_0 c^2$, el potencial de referencia $\phi_0 = \frac{W_0}{q}$, y las condiciones iniciales γ_i y ϕ_i relativas a la velocidad inicial de la partícula y al valor del potencial en el punto que se comienza a integrar, las ecuaciones para las derivadas segundas son:

$$x'' = \alpha(-E_z x' + E_x) \quad (1.30)$$

$$y'' = \alpha(-E_z y' + E_y)$$

$$\text{siendo } \alpha = \frac{(1 + x'^2 + y'^2)(\gamma_0 + \phi_i^* - \phi^*)}{(\gamma_0 + \phi_i^* - \phi^*)^2 - 1} \quad ; \quad \phi_i^* = \frac{\phi_i}{\phi_0} \quad ; \quad \phi^* = \frac{\phi}{\phi_0}$$

De esta forma en cada etapa de la trayectoria se requerirá, en general, calcular el potencial ϕ y las componentes del campo (E_x, E_y, E_z) en varios puntos para avanzar a la posición siguiente.

Señalaremos finalmente que en el caso de que las energías implicadas en la integración no lleven a cambios significativos en la masa de la partícula podremos utilizar la ecuación (1.25) suponiendo la masa constante y simplificando las ecuaciones a la forma no relativista.

1.3.2 Métodos mono-etapa

Existe una variedad amplísima de algoritmos, basados todos ellos en el desarrollo de Taylor hasta distintos órdenes de precisión [10,13,14]. En general, estos métodos son estables y el intervalo de integración se puede modificar de manera continua. Nosotros presentamos en forma muy resumida, una selección de los que consideramos más

adecuados para nuestro fines. Por sencillez, daremos las ecuaciones para integrar en una dimensión. Es inmediata su generalización al cálculo de trayectorias en dos y tres dimensiones.

1.3.2.1 Método de Euler-Richardson

Este algoritmo es una combinación del método de Euler simple y del de extrapolación de Richardson. Tiene la ventaja que, siendo más bien sencillo, puede servir como introducción a algoritmos más sofisticados como el de Dormand-Prince y otros [15].

Dada una ecuación diferencial del tipo newtoniano

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = \frac{F(t, y, v)}{m} \quad (1.31)$$

donde y es la posición, t el tiempo, v la velocidad, m la masa y F la fuerza, la transformaremos en un sistema de dos ecuaciones de primer orden que, para un paso de integración $\Delta t \equiv h$, tiene por aproximación numérica:

$$\begin{aligned} a_n &= f(t_n, y_n, v_n) & f &= \frac{F}{m} \\ v_{n+1} &= v_n + a_n h \\ y_{n+1} &= y_n + v_n h \end{aligned} \quad (1.32)$$

Para este caso la extrapolación de Richardson funciona de la siguiente manera. Si el avance desde un instante t_n al siguiente t_{n+1} se hace en un solo paso, entonces la aproximación al siguiente valor de la posición y viene dada por: $y_{n+1}^{(1)} = y_n + v_n h$, con el error asociado en y del tipo kh^2 , donde la constante k involucra segundas derivadas. Sin embargo, si el avance se realiza en dos medios pasos con un valor intermedio de la velocidad v'_n calculado en el punto medio, entonces el valor de la posición al final del

intervalo es: $y_{n+1}^{(2)} = y_n + v_n \frac{h}{2} + v_n' \frac{h}{2}$, que tiene un término principal de error para $y_{n+1}^{(2)}$

$2k\left(\frac{h}{2}\right)^2 = k \frac{h^2}{2}$. Ahora podemos cancelar el término principal del error mediante la

combinación: $2y_{n+1}^{(2)} - y_{n+1}^{(1)}$ para estimar y en t_{n+1} ; esta es la extrapolación de Richardson, dando finalmente:

$$y_{n+1} = 2y_{n+1}^{(2)} - y_{n+1}^{(1)} = y_n + v_n' h \quad (1.33)$$

Una ventaja del método es que permite una estimación del error en cada paso:

$y_{n+1}^{(2)} - y_{n+1}^{(1)}$. El error, con respecto a una cierta distancia, y_{esc} , típica del problema, es:

$$\delta = |y_{n+1}^{(2)} - y_{n+1}^{(1)}| / y_{esc} = \left| (v_n' - v_n) \frac{h}{2y_{esc}} \right| \quad (1.34)$$

Si el error sobrepasa un factor de tolerancia η prefijado, entonces el tamaño del paso h se reducirá de acuerdo con unos criterios que analizaremos posteriormente.

1.3.2.2 Métodos de Runge-Kutta

Se puede lograr una mayor eficiencia con el conjunto de métodos debido a los matemáticos Runge y Kutta. Se basan en la idea de conseguir una mejor estimación de la pendiente que el método simple de Euler al avanzar desde y_n a y_{n+1} . Para la ecuación $\frac{dy}{dt} = f(t, y)$ la derivada de segundo orden será

$$y_{n+1} = y_n + ak_1 + bk_2$$

$$k_1 = hf(t_n, y_n) \quad (1.35)$$

$$k_2 = hf(x_n + \alpha h, y_n + \beta k_1)$$

Identificando la expresión (1.35) con el desarrollo en serie de Taylor de y_{i+1} hasta los términos de h^2 , podemos determinar los coeficientes a , b , α , y β .

De todos los métodos de Runge-Kutta, el más frecuentemente usado es el de cuarto orden. Se emplean distintos algoritmos, nosotros hemos elegido el más común:

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6 \\
 k_1 &= hf(x_n, y_n) \\
 k_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \\
 k_3 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right) \\
 k_4 &= hf(x_n + h, y_n + k_3)
 \end{aligned} \tag{1.36}$$

El error local es $O(h^5)$ y el error global $O(h^4)$. El método requiere cuatro evaluaciones de $f(t, y)$ por cada paso. Al igual que en el método de Euler, se puede repetir el cálculo con un paso mitad y extrapolar. Se tiene así una estimación de error y para ello se requieren once evaluaciones de la función $f(t, y)$.

1.3.2.3 Fórmulas de Runge-Kutta-Fehlberg

Una característica notable de las fórmulas de Runge-Kutta es que para órdenes M mayores que cuatro, es preciso hacer más de M evaluaciones de la función derivada; ello explica la popularidad del método de 4° orden. Sin embargo, Fehlberg desarrolló un método de 5° orden con seis evaluaciones, para el que otra combinación de las seis funciones da un método de 4° orden. La diferencia entre las dos aproximaciones para y_{n+1} puede utilizarse como estimación del error de truncamiento, permitiendo así ajustar el tamaño del paso. Desde entonces se han elaborado una gran cantidad de algoritmos

basados en esta idea, que constituyen uno de los métodos más utilizados hoy en la integración de ecuaciones diferenciales ordinarias (véase por ejemplo [13]).

El proceso general consiste en plantear las ecuaciones

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^m c_j k_j, \quad \text{error global } O(h^q) \quad (1.37)$$

$$y_{n+1}^* = y_n + h \sum_{j=1}^n c_j^* k_j, \quad \text{error global } O(h^p)$$

en las que los coeficientes k_i vienen dados por

$$\begin{aligned} k_1 &= h f(x_n, y_n) \\ k_2 &= h f(x_n + a_2 h, y_n + b_{21} k_1) \\ &\vdots \\ k_i &= h f(x_n + a_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (1.38)$$

siempre se cumple $q > p$, y con frecuencia $q = p + 1$. Una estimación del error local será por tanto

$$\delta_{n+1} = y_{n+1} - y_{n+1}^* = \sum_{i=1}^m (c_i - c_i^*) k_i \quad (1.39)$$

En la tabla 1.3 se da el esquema de coeficientes para el conjunto de parámetros: $q = 5, p = 4, m = 7, n = 7$, que conoce con el nombre de método de Dormand-Prince de 5° orden. Esta fórmula proporciona un grado de precisión igual al de R-K de 4° orden con extrapolación de Richardson, pero sólo requiere 6 evaluaciones de los campos por lo que su eficiencia es bastante mayor.

Se pueden construir esquemas para valores de p y q mayores [14]; sin embargo, dado que los campos se obtienen por un método numérico con una precisión limitada,

no es conveniente utilizar fórmulas de órdenes mas elevados ya que, en general, disminuyen la eficiencia en el proceso de integración y no mejoran la precisión de los resultados.

i	a_i	b_{ij}					c_i	$c_i - c_i^*$
1	0						$\frac{35}{384}$	$\frac{71}{57600}$
2	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					0	0
3	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				$\frac{500}{1113}$	$-\frac{71}{16695}$
4	$\frac{4}{5}$	$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$			$\frac{125}{192}$	$\frac{71}{1920}$
5	$\frac{8}{9}$	$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{25360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$		$-\frac{2187}{6784}$	$-\frac{17253}{339200}$
6	1	$\frac{9017}{3168}$	$-\frac{355}{33}$	$\frac{46732}{5247}$	$\frac{49}{176}$	$-\frac{5103}{18656}$	$\frac{11}{84}$	$\frac{187}{2100}$
7	1	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	0	$\frac{1}{40}$

Tabla 1.3 *Coefficientes para el método de Dormand-Prince de quinto orden.*

1.3.3 Métodos de multi-etapa

Los métodos de predicción-corrección son, en principio, más eficientes que algunos de los algoritmos previamente referidos. El de cuarto orden requiere solamente dos evaluaciones de la función derivada en lugar de cuatro. Además, para estos métodos

se han construido criterios de precisión y entonces el control del paso puede asegurarse fácilmente [16]. Sin embargo, algunos de ellos son inestables y, en la mayoría, el aumento o reducción de la longitud de paso es bastante complicado requiriendo una interpolación adicional de las fórmulas. A continuación se presentan dos métodos ampliamente utilizados.

1.3.3.1 Método de dos etapas

Esta técnica se debe a Smith y Harrison y tiene la ventaja de trabajar con tamaño de paso variable. Partiendo del desarrollo en serie de Taylor obtuvieron la fórmula para el valor de predicción [17]:

$$y_{n+1} = y_n + v_n h_n + [(3+R)a_n - Ra_{n-1}] \frac{h_n^2}{6} \quad (1.40)$$

donde R es el cociente $\frac{h_n}{h_{n-1}}$. El error local es $O(h_n^4)$ o $O(h_n^4)/R$ si $R < 1$.

La fórmula para la velocidad de predicción también se puede obtener en base al desarrollo en serie de Taylor:

$$v_{n+1} = v_n + \left(\frac{(3+2R)a_{n+1}}{1+R} + (3+R)a_n - \frac{R^2 a_{n-1}}{1+R} \right) \frac{h_n}{6} + O\left[\frac{h^4}{R(1+R)} \right] \quad (1.41)$$

Señalemos que es necesario computar el valor de a_{n+1} para tener v_{n+1} y por ello no se puede usar la fórmula en el caso de que las fuerzas dependan de la velocidad. El valor de la posición corregida se obtiene a partir de

$$y_{n+1} = y_n + v_n h_n + \left(\frac{(2+R)a_{n+1}}{1+R} + (4+R)a_n - \frac{R^2 a_{n-1}}{1+R} \right) \frac{h_n^2}{12} + O(h^5) \quad (1.42)$$

Aquí ha sido preciso calcular la fuerza en la posición corregida por lo cual se requiere más tiempo que si se integra solamente con los valores de predicción.

Nosotros utilizaremos (1.40) y (1.41) para avanzar la trayectoria.

1.3.3.2 Método de Adams-Moulton $O(h^4)$

Este método asume que los valores iniciales han sido calculados por otras técnicas. Construimos una cúbica mediante cuatro puntos, desde x_{n-3} hasta x_n . Efectuando la integración, el error local es $O(h^5)$; el valor resultante de y_{n+1}^* se usa en una integración adicional desde x_{n-2} hasta x_{n+1} para conseguir el corrector y_{n+1} . Estas fórmulas se expresan en términos de diferencias de $f(t, y)$; para su computación es preferible ponerlas como funciones de $f(t, y)$, quedando finalmente las fórmulas [10]:

Predicción:

$$y_{n+1}^* = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) \quad (1.43)$$

Corrección:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1}^* + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) \quad (1.44)$$

La estimación del error se hará en función de la diferencia entre el valor de predicción y el valor de corrección.

1.3.4 Control del paso y selección del método de integración

Cualquier proceso de integración debe incluir un criterio mediante el cual se analice si el intervalo que se ha avanzado está adecuado a la magnitud de las fuerzas actuantes. Así, en regiones en las que los campos son relativamente pequeños, se puede

integrar con un paso grande sin introducir un error importante, mientras que en las zonas de campo elevado el paso ha de ser mucho más reducido. Todos los métodos descritos anteriormente proporcionan una estimación del error local, y será en base a esta cantidad que se establecerá el criterio para dar por bueno el paso dado o bien rechazarlo y volver a avanzar con un paso más pequeño. Además, en función de su valor en relación con la cota de error máximo admisible, se podrá aumentar o disminuir automáticamente la longitud del paso en la etapa siguiente.

En los métodos mono-etapa y en los multi-etapa en los que h se puede variar de forma continua, el control de paso se puede efectuar de manera automática. Sea ε el error máximo admisible y δ_n el error estimado en la n -ésima etapa. De acuerdo con la discusión realizada, se tendrá a $\delta_n = C h_n^{p+1}$, siendo p el error global del método; en general será el valor elegido en (1.37). En el paso asociado a ε será análogamente $\varepsilon = C h_\varepsilon^{p+1}$. Por tanto una estimación del paso a dar en la siguiente etapa –o bien en dicha etapa si es que se ha sobrepasado la cota establecida– sería un valor próximo a h_ε , es decir

$$h_{n+1} = 0.9 h_n \left[\frac{\varepsilon}{\delta_n} \right]^{\frac{1}{p+1}} \quad (1.45)$$

donde el factor 0.9 se introduce por seguridad.

En los métodos multi-etapa la comparación de la cota establecida con el error local lleva a doblar el paso si es que su cociente es mayor que un número establecido (del orden de 20), o a reducirlo a la mitad si por el contrario el cociente se hace menor que la unidad. En este último caso es preciso utilizar fórmulas de interpolación para los campos, lo que complica bastante la utilización de estos algoritmos.

Una vez establecidos los criterios de control del paso para cada método, estamos en condiciones de realizar un estudio comparativo y seleccionar el método más eficiente para nuestro estudio. Con este fin, se ha elegido una lente de dos cilindros a potenciales V_1 y V_2 respectivamente, como se muestra en la Figura 1.7; a lo largo de la misma se integra la trayectoria de un electrón, con las siguientes condiciones iniciales de posición

y velocidad: $r = 10^{-4} \text{ m}$, $z = -2.7 \times 10^{-2} \text{ m}$, $v_r = 0 \text{ ms}^{-1}$, $v_z = \sqrt{\frac{2|e|V_1}{m_0}} \text{ ms}^{-1}$. En primer lugar

se ha caracterizado la trayectoria utilizando cuádruple precisión tanto para el cálculo de las densidades de carga sobre los electrodos como para hacer la integración.

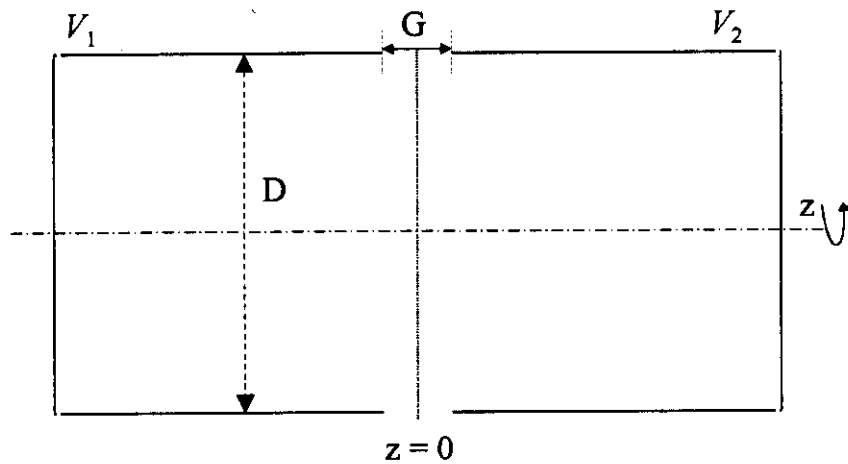


Figura 1.7 Lente de dos cilindros con el gap $G = 0.1D = 10^{-3} \text{ m}$; $\frac{V_2}{V_1} = 4$.

Se han programado varios métodos integrando siempre con paso constante. El proceso se termina en $z = 2.7 \times 10^{-2} \text{ m}$ obteniéndose con todos ellos un valor de la pendiente

$\frac{v_r}{v_z} = -2.04693 \times 10^{-3}$. Asimismo, se ha evaluado el error de las velocidades mediante la

comparación de la energía final de la partícula, asociada a esas velocidades, y la correspondiente a una aceleración a través de la diferencia de potencial $V_2 - V_1$. El mejor

resultado se ha obtenido para el método de Dormand-Prince con un paso $h = 10^{-3} m$, dando un error relativo del $5.9 \times 10^{-5} (\%)$.

Con estos resultados como referencia, se han repetido los cálculos usando doble precisión (que es la utilizada en nuestro estudio), y con control de paso en cada uno de los algoritmos. La eficiencia de cada método se evalúa en términos del número total de llamadas a la rutina de cálculo de las componentes del campo para conseguir las mismas cifras de precisión en el valor de la pendiente. Este criterio se ha adoptado teniendo cuenta que es la computación de los campos lo que realmente requiere tiempo de cálculo, al integrar con el método de elementos de contorno.

Método	Pendiente	Error relativo de la energía (%)	Número de llamadas
Euler-Richardson	-2.04697×10^{-3}	4.37×10^{-4}	1872
Adams-Moulton	-2.04698×10^{-3}	2.92×10^{-3}	543
Smith-Harrison	-2.04693×10^{-3}	1.52×10^{-4}	490
Runge-Kutta 5º orden	-2.04692×10^{-3}	1.74×10^{-4}	420
Dormand-Prince 5º orden	-2.04693×10^{-3}	1.23×10^{-4}	288

Tabla 1.4 *Comparación de los diferentes métodos de integración.*

En la tabla 1.4, se muestran los valores obtenidos en esta comparación. Se puede concluir que en general son más eficientes los métodos de orden más alto tales como Runge-Kutta y Dormand-Prince de 5º orden. Por ello, son los métodos que hemos seleccionado –en particular el último– para el cálculo de trayectorias en todo lo que sigue.

1.4 Bibliografía

- [1] P. Grivet, *Electron Optics*, Pergamon Press, Caps. 2, 8 y 10, (1972).
- [2] A. Septier, *Focusing of Charged Particles*, Academic Press, Caps. 1 y 2, (1967).
- [3] P. W. Hawkes y E. Kasper, *Electron Optics*, Academic Press, Caps. 6, 7 y 19, (1989).
- [4] R. F. Harrington, *Field Computation by Moment Methods*, Mac Millan, Caps. 1, 2, (1968).
- [5] K. J. Binns, P. J. Lawrenson y C. W. Trowbridge, *The analytical and Numerical Solution of Electric and Magnetic Fields*, John Wiley and Sons, Cap. 9, (1992).
- [6] G. Martínez y M. Sancho, *Four-cylinder electrostatic lens I: potential distribution and focal properties*, J. Phys. E: Sci. Instrum. **62**, 625-630, (1983).
- [7] G. Martínez y M. Sancho, *Application of the integral equation method to the analysis of electrostatic potentials and electron trajectories*, en: Adv. Electron. and Electron Phys. **81**, 1-41, Academic press, New York, (1991).
- [8] M. Sancho y G. Martínez, *Electrostatic modeling of dipole-ion interactions in gramicidinlike channels*, Biophys. J. **60**, 81-88, (1991).
- [9] J. D. Jackson, *Electrodinámica Clásica*, Alambra, Caps. 2 y 3, (1980).
- [10] C. F. Gerald y P. O. Wheatley, *Applied Numerical Analysis*, Addison Wesley, Caps. 2, 4 y 5, (1989).
- [11] A. Septier, *Strong-Focusing Lenses*, en: Adv. Electron. and Electron Phys. **XIV**, 86-205, Academic Press, (1961).
- [12] A. D. Dymnikov, G. Martínez y A. H. Azbaid, *The matrizant method for an optimal synthesis of electrostatic multiple cylinder lenses*, Nucl. Instr. and Meth. A **403**, 195-204, (1998).

- [13] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling y B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The art of scientific computing*, Cambridge U. P., Cap. 16, (1994).
- [14] G. Engeln-Müllges y F. Reutter, *Numerik-Algorithmen*, VDI Verlag Gmb, Cap. 17, (1996).
- [15] I. R. Gatland, *Numerical integration of Newton's equations including velocity-dependent forces*, Am. J. Phys. **62**, 259-265, (1994).
- [16] E. Kasper, *Numerical method of field calculation and ray tracing*, Lecture Notes, Universidad de Tübingen, 247-255, (1988).
- [17] R. Smith y D. E. Harrison, *Algorithms for molecular dynamics simulations of keV particle bombardement*, Computers in Physics, 68-73, (1989).

Capítulo 2

SÍNTESIS OPTIMIZADA DE LENTES ELECTROSTÁTICAS CON SIMETRÍA DE ROTACIÓN

2.1 Introducción

Los fundamentos de la óptica de partículas cargadas fueron establecidos en una publicación de H. Busch el año 1926 [1]. Mostraba cómo los rayos catódicos podían ser enfocados por campos eléctricos o magnéticos con simetría de rotación; asimismo, presentaba una ecuación de movimiento para el cálculo de trayectorias en la zona paraxial. Desde entonces, esta disciplina de la Física Aplicada se ha desarrollado extraordinariamente, posibilitando a su vez la realización de experimentos más y más sofisticados. Mencionemos las instalaciones con grandes aceleradores tanto lineales como circulares, la variedad de experimentos montados en torno a un anillo de radiación sincrotrón, o los microscopios electrónicos de alta resolución como ejemplos que ilustran el amplio rango de aplicaciones que cubre el tema que nos ocupa [2,3].

Las lentes electrostáticas, y en particular las lentes cilíndricas, fueron utilizadas desde el principio por la sencillez de su montaje y por la existencia de aproximaciones analíticas que permitían su caracterización en algunos casos [4,5,6]. Después, en paralelo con el auge de los microscopios electrónicos, fueron desarrollándose nuevas y mejores configuraciones [7,8]. La aparición de ordenadores aumentó notablemente la capacidad de cálculo y permitió que, a partir de los años 70, hubiera un gran avance en la aplicación de métodos numéricos tanto en la determinación de los campos como en la integración de trayectorias [9,10]. Podemos decir que hoy este tipo de lentes se usa en experimentos que cubren energías desde unos pocos eV en *scattering* de electrones con átomos, hasta cerca de $100 MeV$ en aceleradores lineales [3,11,12].

Al comparar las prestaciones de las lentes electrostáticas con las de las magnéticas, se suele destacar dos inconvenientes: menos capacidad para enfocar y peor comportamiento en lo que se refiere a aberraciones geométricas y cromáticas. Tras una

breve descripción de la óptica paraxial y de las aberraciones de tercer orden, pasaremos a presentar un nuevo método de síntesis –basado en la combinación de dos modelos– que mostrará cómo minimizar las aberraciones geométricas en lentes cilíndricas. Además, se estudiará una lente capaz de acelerar partículas cargadas a 150 keV y con un poder de enfoque relativamente elevado.

Esta técnica se puede aplicar a cualquier sistema de enfoque; veremos en el capítulo siguiente cómo se extiende al diseño optimizado de sistemas cuadrupolares.

2.2 Caracterización de las propiedades ópticas

La óptica electrónica consiste en estudiar las leyes que gobiernan el comportamiento de las partículas cargadas bajo la acción de un sistema de enfoque, desde que parten del plano objeto hasta que salen de la lente dando lugar a la formación de una imagen real o virtual, en el plano imagen. Sin embargo, existen dos alternativas o métodos para controlar las trayectorias de dichas partículas. El primero fue desarrollado por L. de Broglie; se define un índice de refracción –por analogía con los rayos luminosos– de tal forma que la trayectoria de la partícula cumpla las leyes de la refracción; una vez que se ha determinado éste pueden tabularse las propiedades de las lentes a partir de sus correspondientes modelos ópticos [13]. El segundo está basado en el formalismo clásico de las leyes de la mecánica y el electromagnetismo [14]. A efectos prácticos, es mucho más utilizado este aún siendo menos potente que el anterior; se debe a que relaciona más directamente las propiedades con los aspectos de diseños experimentales. Por esto, será el que nosotros emplearemos en nuestro estudio.

En esta sección haremos una breve introducción a los principales aspectos teóricos, relativos a las propiedades de enfoque y a las aberraciones dentro de la óptica electrónica.

2.2.1 Óptica paraxial

La forma general de las ecuaciones de las trayectorias en los campos electromagnéticos resulta complicada en situaciones prácticas. El comportamiento de los diversos elementos ópticos puede ser caracterizado por ecuaciones más simples cuando se trabaja sólo en la zona próxima al eje, donde se desprecian los términos de órdenes mayores que la unidad, con lo que el estudio óptico de las lentes electrostáticas que vamos a realizar se simplifica notablemente. El análisis de las propiedades de una lente para la aproximación de primer orden se conoce como Optica Gaussiana y la región en la que ésta es aplicable recibe el nombre de zona paraxial.

Estudiaremos la ecuación paraxial de los sistemas electrostáticos con simetría rotacional. En este caso se puede obtener el potencial en cualquier punto a partir del potencial axial y sus derivadas mediante el desarrollo en serie de la función $\Phi(r, z)$ [2],

$$\Phi(r, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \left(\frac{r}{2}\right)^{2n} \phi^{(2n)}(z) \quad (2.1)$$

así, para la aproximación Gaussiana el potencial y las componentes del campo eléctrico serán

$$\begin{aligned} \Phi(r, z) &= \phi(z) - \frac{r^2}{4} \phi''(z) \\ E_r(r, z) &= \frac{r}{2} \phi''(z) \\ E_z(r, z) &= -\phi'(z) \end{aligned} \quad (2.2)$$

$\phi(z)$, $\phi'(z)$ y $\phi''(z)$ representan el valor del potencial en el eje y sus derivadas respecto de la variable z .

Consideremos ahora el cálculo de las trayectorias introduciendo la aproximación Gaussiana. La ecuación de movimiento en la dirección radial, para el caso no relativista e ignorando el efecto de carga espacial, se expresa en la forma

$$F_r = m \frac{d^2 r}{dt^2} = -\frac{e r}{2} \phi''(z) \quad (2.3)$$

m es la masa del electrón y $-e$ su carga. Para el movimiento en la dirección axial, podemos obtener una ecuación diferencial de primer orden imponiendo la conservación de energía

$$\frac{1}{2} m \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 = e \phi(z) \quad (2.4)$$

donde se ha despreciado la energía correspondiente a la componente radial de la velocidad; esto es razonable teniendo cuenta que la trayectoria va a formar siempre ángulos muy pequeños con el eje y por ello dicha componente va a ser mucho menor que $\frac{dz}{dt}$. Eliminando el tiempo entre la ecuación (2.3) y (2.4) obtenemos

$$\sqrt{\phi(z)} \frac{d}{dz} \left\{ \sqrt{\phi(z)} \frac{dr}{dz} \right\} = -\frac{1}{4} r \phi''(z) \quad (2.5)$$

o bien

$$\frac{d^2 r}{dz^2} + \frac{\phi'(z)}{2\phi(z)} \frac{dr}{dz} + \frac{\phi''(z)}{4\phi(z)} r = 0 \quad (2.6)$$

La ecuación (2.6) para una trayectoria Gaussiana puede dar problemas al usarla, debido a la presencia de termino $\phi''(z)$, ya que si se ha determinado el potencial $\phi(z)$ por algún método numérico, la derivada segunda de este potencial se obtiene por diferenciación numérica y, en general, vendrá afectada de un gran error; por ello es preferible transformar la ecuación (2.6) mediante el cambio

$$R = r[\phi(z)]^{1/4} \quad (2.7)$$

la curva $R(z)$ se llama rayo reducido, y la ecuación (2.6) queda entonces en la forma

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \frac{3}{16} \left(\frac{\phi'}{\phi} \right)^2 R = 0 \quad (2.8)$$

que constituye la ecuación reducida o ecuación de Picht de la trayectoria.

La ecuación para una trayectoria Gaussiana (2.6) y la ecuación de Picht (2.8) son dos ecuaciones lineales y por tanto, conocidas dos soluciones particulares independientes, $r_1 = X(z)$ y $r_2 = Y(z)$, podemos obtener cualquier trayectoria mediante la adecuada combinación lineal de éstos.

Las trayectorias r_1, r_2 son arbitrarias, pero en la óptica electrónica suele utilizarse dos rayos típicos: $X(z)$ corta al eje en $z = z_0$ (plano objeto), formando un ángulo de 45° con aquél, es decir $X(z_0) = 0, \left(\frac{dX}{dz} \right)_{z=z_0} = 1$; $Y(z)$ pasa por el plano objeto a una distancia unidad del eje y corta al mismo en el plano central de la lente, o sea, $Y(z_0) = 1, \left(\frac{dY}{dz} \right)_{z=z_0} = 0$. Entonces cualquier rayo en el plano imagen puede representarse por simple superposición de estos dos rayos especiales [14],

$$r(z_i) = Y(z_i) r(z_0) + X(z_i) \left(\frac{dr}{dz} \right)_{z=z_0} \quad (2.9)$$

$$\left(\frac{dr}{dz} \right)_{z=z_i} = \left(\frac{dY}{dz} \right)_{z=z_i} r(z_0) + \left(\frac{dX}{dz} \right)_{z=z_i} \left(\frac{dr}{dz} \right)_{z=z_0}$$

De las ecuaciones (2.9) podemos concluir que a cada punto objeto situado en el plano $z = z_0$ le corresponde un punto imagen situado en el plano perpendicular al eje y que pasa por el punto z_i , tal que $X(z_i) = 0$; esto lo que se denomina condición

estigmática. La imagen reunirá pues dos cualidades importantes: fidelidad, es decir será similar al objeto, y nitidez.

Vamos a establecer una relación interesante entre $X(z)$ e $Y(z)$ que necesitaremos a la hora de calcular el coeficiente de aberración esférica. Tanto $X(z)$ como $Y(z)$ verifican la ecuación (2.5), entonces

$$\sqrt{\phi(z)} \frac{d}{dz} \left\{ \sqrt{\phi(z)} \frac{dX(z)}{dz} \right\} = -\frac{1}{4} X(z) \phi''(z) \quad (2.10)$$

$$\sqrt{\phi(z)} \frac{d}{dz} \left\{ \sqrt{\phi(z)} \frac{dY(z)}{dz} \right\} = -\frac{1}{4} Y(z) \phi''(z) \quad (2.11)$$

podemos eliminar el término en $\phi''(z)$ multiplicando las ecuaciones (2.10) y (2.11) por $Y(z)$ y $X(z)$ respectivamente y restándolas, queda entonces

$$\frac{d}{dz} \left[\sqrt{\phi(z)} \left\{ Y(z) \frac{dX(z)}{dz} - X(z) \frac{dY(z)}{dz} \right\} \right] = 0 \quad (2.12)$$

integrando

$$\sqrt{\phi(z)} \left[Y(z) \frac{dX(z)}{dz} - X(z) \frac{dY(z)}{dz} \right] = \sqrt{\phi_0(z)} \left[Y_0(z) \left(\frac{dX(z)}{dz} \right)_0 - X_0(z) \left(\frac{dY(z)}{dz} \right)_0 \right] \quad (2.13)$$

en donde el subíndice cero se refiere al punto objeto en estudio. Teniendo en cuenta las características de $X(z)$ e $Y(z)$ resulta finalmente la relación

$$Y(z) \frac{dX(z)}{dz} - X(z) \frac{dY(z)}{dz} = \sqrt{\frac{\phi_0(z)}{\phi(z)}} \quad (2.14)$$

Vemos que es suficiente conocer la distribución del potencial y sus derivadas en el eje de la lente para determinar cualquier trayectoria de una partícula cargada en la región paraxial. Sin embargo, al igual que se hace en Óptica Geométrica, el estudio de esta zona puede reducirse a la definición de una serie de parámetros que caracterizan

completamente el comportamiento de la lente en ella. En la práctica las lentes tendrán una “anchura” bien definida, en la que el campo afecta de forma apreciable a las trayectorias, pero la Óptica Electrónica no trata éstas sino sus asíntotas. Al hacer el estudio teórico se supone que el objeto y la imagen se sitúan en regiones donde el campo es nulo; por tanto en las regiones de campo apreciable sólo podremos tratar con objetos e imágenes virtuales; aunque ello suponga una limitación ésta no es importante porque en la mayoría de las aplicaciones prácticas no interesan objetos e imágenes reales inmersos en la lente.

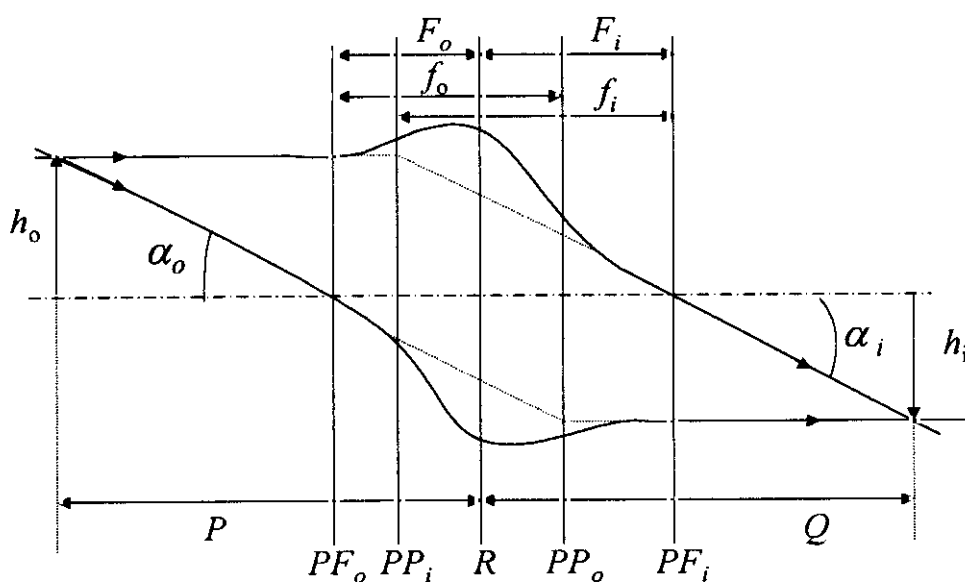


Figura 2.1 Elementos cardinales de una lente electrostática.

Estudiaremos dos rayos paraxiales particulares que definen los elementos cardinales de una lente gruesa; uno viene paralelo al eje en el espacio objeto, entra en la lente y su asíntota corta el eje en el plano focal PF_i , y la asíntota del otro corta el eje en el plano focal PF_o y saldrá en el espacio imagen paralelo al eje. En la Figura 2.1 se muestra cómo se obtienen estos elementos cardinales. R es el plano de referencia de la lente (generalmente el plano medio), PP_o y PP_i los planos principales. Las coordenadas

de los planos principales z_{PP_o} , z_{PP_i} , las de los planos focales z_{PF_o} , z_{PF_i} y las correspondientes distancias focales objeto e imagen f_o , f_i , constituyen los *elementos cardinales* de la lente. Estos elementos son conocidos como planos principales asintóticos y distancias focales asintóticas. Como criterio de signo hemos definido la dirección positiva del eje de la lente en el sentido de las trayectorias así que las distancias focales se definen positivamente de la forma siguiente $f_o = z_{PP_o} - z_{PF_o}$ y $f_i = z_{PF_i} - z_{PP_i}$ en este caso se dice que la lente opera en el primer rango. Puede ocurrir que haya dos, tres cortes y la lente operará en el segundo rango o tercer rango; en el segundo rango las distancias focales son negativas.

De la Figura 2.1 se puede definir otras magnitudes de interés tales como las distancias focales medias $F_o = f_o - z_{PP_o}$; $F_i = f_i + z_{PP_i}$; el aumento lateral o magnificación definido por el cociente $\frac{h_i}{h_o}$; el aumento angular $\lambda = \frac{\alpha_i}{\alpha_o}$ y la potencia de

la lente dada por $K_p = \pm \frac{1}{\sqrt{f_o f_i}}$. Comparando triángulos semejantes en la Figura 2.1

puede verse que la relación de Newton para lentes gruesas es válida en el caso de objetos formados por rayos paraxiales; así se verifica

$$(P - F_o)(Q - F_i) = f_o f_i \quad (2.15)$$

y el aumento lateral puede obtenerse como

$$M = \frac{-f_o}{P - f_o} = \frac{Q - f_i}{-f_i} \quad (2.16)$$

Por último, señalar que en el presente trabajo caracterizaremos sistemas cuya imagen es siempre de tamaño inferior al objeto. Nos interesa, pues, utilizar una

magnitud que viene dada por el inverso del aumento lateral y que denominamos desmagnificación[†], $\mathcal{D} = \frac{1}{M}$.

2.2.2 Ecuaciones relativistas. Descripción matricial de la trayectoria

Hasta ahora hemos considerado el caso no relativista. Sin embargo en algunas de las lentes que estudiaremos más adelante necesitamos integrar las ecuaciones relativistas del haz. Es inmediato hacer esta generalización [12,15,16]. Nosotros seguiremos la formulación desarrollada para el caso de lentes cilíndricas [17].

Por conveniencia introducimos las siguientes variables reducidas,

$$\phi_r(z) = \frac{\phi(z)}{\phi_0} ; \phi_0 = W_0 / q ; \gamma(z) = 1 + K(z)/W_0 ; p_r(z) = \frac{p(z)}{m_0 c} = \sqrt{\gamma^2(z) - 1} \quad (2.17)$$

las cantidades $p(z), K(z)$ y q denotan el momento lineal, la energía cinética y la carga de una partícula de referencia que se mueve a lo largo del eje Oz , mientras que W_0, m_0 , y ϕ_0 denotan la energía, la masa y el potencial de reposo, de la misma. $\phi(z)$ es el potencial axial. Para protones $W_0 = 938.26$ MeV y para electrones $W_0 = 511$ keV.

Utilizando coordenadas cartesianas —con vistas a un planteamiento más general— el potencial reducido en un punto de la zona paraxial vendrá dado según el desarrollo (2.1) por

$$\Phi_r(x, y, z) = \phi_r(z) - \frac{x^2 + y^2}{4} \phi_r''(z) \quad (2.18)$$

La ecuación de movimiento de primer orden de una partícula relativista en el plano Oxz se puede escribir como [15]

[†] Traducción al español de la palabra inglesa *demagnification*. No existe un vocablo en los diccionarios especializados para definir esta variable, pero hemos creído conveniente utilizar esta expresión.

$$x'' = f_1(z)x + f_2(z)x' \quad (2.19)$$

siendo $x' = \frac{dx}{dz}$, $x'' = \frac{dx'}{dz}$, y

$$f_1(z) = \frac{\gamma(z)\phi_r''(z)}{2p_r^2(z)} \quad ; \quad f_2(z) = \frac{\gamma(z)\phi_r'(z)}{p_r^2(z)} \quad (2.20)$$

Es conveniente hacer los cambios de variable $x_1 = x$, $x_2 = \frac{p(z)}{p(z_0)}x'$ con lo que la ecuación (2.19) se convierte en un par de ecuaciones de primer orden

$$x_1' = \frac{p(z_0)}{p(z)}x_2 \quad ; \quad x_2' = w_1(z)x_1 \quad (2.21)$$

donde

$$w_1(z) = \frac{\gamma(z)\phi_r''(z)}{2p_r(z_0)p_r(z)} \quad (2.22)$$

Basándonos en la linealidad de estas ecuaciones, se puede describir la óptica paraxial mediante una representación matricial de una manera elegante y muy sencilla a la vez. Siguiendo un razonamiento análogo al que nos llevó a establecer las ecuaciones (2.9) en encontramos que

$$\begin{pmatrix} x_i \\ \frac{p(z_i)}{p(z_0)}x_i' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11x} & R_{12x} \\ R_{21x} & R_{22x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_0' \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

donde x_i el tamaño de la imagen, x_i' la pendiente de la trayectoria en el plano imagen

($x' = \frac{dx}{dt} \frac{dt}{dz} = \frac{v_x}{v_z}$), x_0 el tamaño del objeto y x_0' su pendiente ($x_0' = \frac{v_{x_0}}{v_{z_0}}$). La matriz $[R]_x$

es conocida como la matriz de transferencia y se puede comprobar que su determinante es igual a la unidad [6].

Para determinar los elementos de esta matriz supongamos en primer lugar que un rayo entra en la lente paralelo al eje, es decir que x'_0 es nulo, entonces

$$R_{11x} = \frac{x_i}{x_0}, \quad R_{21x} = \frac{p(z_i) x'_i}{p(z_0) x_0} \quad \text{para } x'_0 = 0 \quad (2.24)$$

Si ahora suponemos que entra un rayo en la lente procedente de la posición $x_0 = 0$ en el plano objeto, se tendrá

$$R_{12x} = \frac{x_i}{x'_0}, \quad R_{22x} = \frac{p(z_i) x'_i}{p(z_0) x'_0} \quad \text{para } x_0 = 0 \quad (2.25)$$

De forma completamente análoga se pueden definir los coeficientes $[R]_y$ para trayectorias que transcurran en el plano Oyz . Notemos que en los sistemas con simetría rotacional ambas matrices son iguales. Estos parámetros juegan un papel muy importante, como luego veremos, a la hora de establecer la conexión entre los dos modelos para efectuar la síntesis.

2.2.3 Aberraciones geométricas

El estudio de las propiedades de la lente que hemos realizado hasta ahora se ha hecho en la zona muy próxima al eje, y considerando una situación ideal. En general, la imagen que se encuentra no es exactamente la esperada sino una distorsionada debido a los defectos inherentes al sistema de enfoque. Existen varios tipos de defectos o aberraciones que son responsables de esas distorsiones. Fluctuaciones en los potenciales de aceleración, la extracción de partículas de regiones no equipotenciales, etc., van a provocar una aberración cromática. La construcción y el alineamiento del sistema no son perfectos y por lo tanto se presentan aberraciones de tipo mecánico. Estas dos aberraciones serán estudiadas con detalle en el siguiente capítulo. Cuando se utiliza una aproximación de tercer orden se encuentra que las aberraciones geométricas deterioran

la calidad y fidelidad de la imagen gaussiana; este apartado vamos a dedicarlo al estudio de este tipo de aberraciones.

Normalmente, una vez que el haz de partículas ha sido acelerado, se selecciona su parte central haciéndolo pasar por una rendija que actúa como *objeto*. A continuación se coloca un segundo *diafragma* que controla las desviaciones angulares de las trayectorias y por tanto las aberraciones que vamos analizar.

La aproximación gaussiana deja de ser válida a medida que las trayectorias van formando ángulos mayores con el eje de rotación; en la zona inmediata a la de Gauss, denominada área de Seidel, hay que incluir los términos de tercer orden para obtener los valores de las magnitudes con una precisión aceptable. De acuerdo con la ecuación (2.1) el potencial y el campo en esta zona serán

$$\begin{aligned}\Phi(r, z) &= \phi(z) - \frac{r^2}{4} \phi''(z) + \frac{r^4}{64} \phi^{IV}(z) \\ E_r(r, z) &= \frac{r}{2} \phi''(z) - \frac{r^3}{16} \phi^{IV}(z) \\ E_z(r, z) &= -\phi'(z) + \frac{r^2}{4} \phi'''(z)\end{aligned}\tag{2.26}$$

Al introducir estos valores en las ecuaciones de las trayectorias se tiene que para un punto objeto dado, $O(x_o, y_o)$, el punto imagen no se encuentra situado en $I(x_i, y_i)$ que correspondería a la trayectoria gaussiana sino que se encuentra desplazada en el punto $I'(x'_i, y'_i)$. Sea $N(x_d, y_d)$ el punto por el que el rayo pasa a través del diafragma que limita la extensión del haz; el vector (ξ, η) que caracteriza la aberración es entonces función del punto objeto y de N

$$\begin{aligned}\xi &= x'_i - x_i = f(x_o, y_o, x_d, y_d) \\ \eta &= y'_i - y_i = g(x_o, y_o, x_d, y_d)\end{aligned}\tag{2.27}$$

si desarrollamos en serie hasta tercer orden teniendo en cuenta que una rotación de 180° cambia los signos de x_o, y_o, x_d, y_d , por tanto los términos pares deben anularse, queda una expresión que contiene veinte coeficientes para ξ y otros tantos para η [18].

Hagamos los cambios de variable

$$\begin{aligned} u &= x_o + j y_o = \beta e^{j\theta} \\ v &= x_d + j y_d = r e^{j\psi} \\ w &= \xi + j \eta \end{aligned} \quad (2.28)$$

en donde w va a ser función de u, v y de sus conjugados $\bar{u} = x_o - j y_o$, $\bar{v} = x_d - j y_d$.

Teniendo en cuenta la simetría de rotación y el teorema de Malus-Dupin que establece que todos los rayos son normales a las superficies de onda, se llega a que el número total de coeficientes par este tipo de sistemas se reduce a cinco, esto es

$$w = A v^2 \bar{v} + B u^2 \bar{u} + C u \bar{u} v + D v (\bar{u} v + 2 y \bar{v}) + F u^2 \bar{u} \quad (2.29)$$

Si todos los sumando de la ecuación (2.29) son del mismo orden resulta muy difícil analizar la forma de la figura de aberración; sin embargo es posible imaginar condiciones experimentales ideales en las que sólo algunos de los términos sean significativos. Veamos una de estas condiciones:

2.2.3.1 Aberraciones producidas por la apertura

Supongamos que el objeto se encuentra muy próximo al eje e ilumina totalmente el diafragma; para simplificar haremos $\theta = 0$.

i) Aberración esférica

Cuando el punto objeto se encuentra en el eje se tiene $u = 0$ y la ecuación (2.29) se reduce a

$$w = A r^3 e^{j\psi} \quad (2.30)$$

En este caso es sencillo analizar la figura de aberración. Si imaginamos un pincel de rayos que parte de 0 y ocupa una circunferencia de radio r en el diafragma el ángulo ψ habrá variado entre 0 y 2π ; ello implica que el punto I' se mueve en una circunferencia de centro I y radio Ar^3 ; si consideramos la totalidad del diafragma con un radio R la figura de aberración será pues un círculo de radio AR^3 . La constante A se denomina coeficiente de aberración esférica.

Este defecto es producido por los campos que son siempre más intensos cerca de los electrodos lo que obliga a los rayos marginales a cortar al eje antes que los paraxiales, dando lugar a que la imagen de un punto se difumine en un disco. Un análisis posterior muestra que el pincel pasa por un plano en el que su radio es mínimo e igual a $AR^3/4$; el disco de aberración en este plano se llama círculo de máxima nitidez.

ii) Coma

Supongamos ahora que la aberración esférica es despreciable para un par de planos conjugados z_o, z_i . Si el objeto está suficientemente próximo al eje de forma que los términos en u^2 y u^3 sean despreciables, la aberración queda en la forma

$$w = Dr^2 \beta (e^{2j\psi} + 2) \quad (2.31)$$

para un pincel que pase con un radio r por el diafragma, la figura de aberración es una circunferencia de radio $Dr^2 \beta$ centrada en un punto que dista $2Dr^2 \beta$ del punto imagen gaussiano; esta circunferencia es barrida dos veces al variar ψ entre 0 y 2π . La imagen de 0 que resulta al barrer todo el diafragma es una figura que recuerda la forma de un cometa (de ahí el nombre de esta aberración) siendo las envolventes de las circunferencias dos rectas que forma 60° entre sí; esta imagen se encuentra en el plano z_i . La constante D que caracteriza la aberración se llama coeficiente de coma.

En los sistemas ópticos de luz es posible observar coma puro si se ha corregido totalmente la aberración esférica; en los sistemas electrostáticos no se puede eliminar nunca ésta última, siendo en general bastante más significativa que el coma.

2.2.3.2 Aberraciones de campo

Estas aberraciones son producidas por objetos que se encuentran alejados del eje pero la apertura del diafragma es lo suficientemente pequeña como para que todos los términos de v con exponente mayor que la unidad sean despreciables. Trabajamos pues con un pincel infinitesimal y la ecuación (2.29) queda reducida a

$$w = B \beta^2 r e^{-j\psi} + C \beta^2 r e^{j\psi} + F \beta^3 \quad (2.32)$$

i) Distorsión

El último término de la ecuación (2.32) es independiente de la posición del rayo al pasar por el diafragma y por tanto no produce una mancha en el plano imagen sino un desplazamiento de la imagen que dependerá de la magnitud y el signo del coeficiente de distorsión F . Este resultado muestra la incapacidad del sistema para mantener constante el aumento lateral.

ii) Astigmatismo y curvatura de imagen

Si suponemos implícita la traslación de la imagen debida a la distorsión el término restante que caracteriza la aberración será

$$w = \beta^2 r (B e^{-j\psi} + C e^{j\psi}) \quad (2.33)$$

Un pincel de rayos que pase a través del diafragma con un radio r describirá en el plano imagen una elipse de eje mayor $2 \beta^2 r (B + C)$ y eje menor $2 \beta^2 r (B - C)$ y si se ilumina todo el diafragma la imagen resultante será elíptica, excepto en dos planos —donde se encuentra los centros de curvatura de la superficie de onda— que degenera en

dos segmentos de recta; estas dos imágenes se denominan imágenes astigmáticas y puede demostrarse que la distancia axial que las separa depende sólo del término B denominado coeficiente de astigmatismo.

Las imágenes astigmáticas sólo interesan en el caso de objetos rectilíneos, en los restantes la mejor imagen corresponde a una entre todas las elípticas que es circular. La distancia entre este círculo de mínima confusión y el plano imagen gaussiano depende exclusivamente de la constante C o coeficiente de curvatura de imagen. Su presencia en (2.33) implica que la mejor imagen se tiene en una pantalla de curvatura cóncava y no en una plana.

2.2.3.3 Cálculo de los coeficientes de aberración. Método de trayectorias

Se han desarrollado diversos procedimientos matemáticos para calcular los coeficientes de aberración anteriormente vistos. Nosotros describiremos el método de trayectorias que se adapta mejor al estudio de sistemas de enfoque.

Vamos a ver con detalle el cálculo del coeficiente de aberración esférica para un sistema con simetría axial. Las ecuaciones de movimiento deben incluir los términos de tercer orden y por tanto serán

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -e \left(\frac{r}{2} \phi''(z) - \frac{r^3}{16} \phi^{IV}(z) \right) \quad (2.34)$$

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = e \left(\phi'(z) - \frac{r^2}{4} \phi'''(z) \right)$$

imponiendo la condición de conservación de la energía que ahora incluye la correspondiente a la componente radial de la velocidad, y combinándola con (2.34), se tiene para la trayectoria de un electrón en la zona de Seidel

$$\frac{d^2 r}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{\phi'}{\phi} \frac{dr}{dz} + \frac{1}{4} \frac{\phi''}{\phi} r = \left\{ \frac{1}{32} \frac{\phi^{IV}}{\phi} - \frac{1}{16} \left(\frac{\phi''}{\phi} \right)^2 \right\} r^3 + \frac{1}{8} \left\{ \frac{\phi'''}{\phi} - \frac{\phi'' \phi'}{\phi^2} \right\} r^2 r' - \frac{1}{4} \frac{\phi''}{\phi} r r'^2 - \frac{1}{2} \frac{\phi'}{\phi} r'^3 + \dots \quad (2.35)$$

puesto que los términos de aberración son pequeños puede resolverse (2.35) por un método perturbativo. Así, hacemos

$$r = r_0 + \varepsilon \quad (2.36)$$

en donde r_0 representa la trayectoria gaussiana y ε la perturbación que suponemos lo suficientemente pequeña como para que las potencias mayores que la unidad sean despreciables. Llevando (2.36) a (2.35) la ecuación resultante para la perturbación es

$$\frac{d^2 \varepsilon}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{\phi'}{\phi} \frac{d\varepsilon}{dz} + \frac{1}{4} \frac{\phi''}{\phi} \varepsilon = \left\{ \frac{1}{32} \frac{\phi^{IV}}{\phi} - \frac{1}{16} \left(\frac{\phi''}{\phi} \right)^2 \right\} r_0^3 + \frac{1}{8} \left\{ \frac{\phi'''}{\phi} - \frac{\phi'' \phi'}{\phi^2} \right\} r_0^2 r_0' - \frac{1}{4} \frac{\phi''}{\phi} r_0 r_0'^2 - \frac{1}{2} \frac{\phi'}{\phi} r_0'^3 \quad (2.37)$$

Se trata pues de una ecuación diferencial de 2º orden con un término independiente de ε . Puede resolverse por el método de variación de parámetros, si se conocen dos soluciones de la ecuación homogénea que no es otra que la de las trayectorias gaussianas y, por consiguiente, podemos hacer uso de los rayos $X(z)$ e $Y(z)$ definidos anteriormente.

Supongamos un rayo paraxial que parte de un punto z_0 , situado en el eje con una pendiente α , de forma que

$$r_0 = \alpha X(z) \quad (2.38)$$

supongamos también que la perturbación se puede escribir en la forma

$$\varepsilon = \alpha(z)X(z) + \beta(z)Y(z) \quad (2.39)$$

Es evidente que se ha de verificar $\varepsilon(z_0) = \varepsilon'(z_0) = 0$ ya que en ese punto la trayectoria coincide con la gaussiana.

Aplicando a (2.39) el método de variación de parámetros se tiene

$$\begin{aligned}\alpha'(z)X(z) + \beta'(z)Y(z) &= 0 \\ \alpha'(z)X'(z) + \beta'(z)Y'(z) &= \alpha^3 P(X, X', \psi)\end{aligned}\tag{2.40}$$

P presenta el término independiente de la ecuación (2.37) en donde se ha sustituido r_0 por su valor de acuerdo con (2.38).

La aberración esférica representa el valor de ε en el plano imagen gaussiano, es decir en $z = z_i$; pero $X(z_i) = 0$ y por tanto de (2.39)

$$|w| = \varepsilon(z_i) = \beta(z_i)Y(z_i)\tag{2.41}$$

Resolviendo el sistema (2.40) se tiene

$$\beta'(z) = \frac{\alpha^3 X P}{X'Y - XY'}\tag{2.42}$$

pero de acuerdo con la ecuación (2.14) podemos simplificar la expresión anterior quedando

$$\beta'(z) = \alpha^3 \left(\frac{\phi}{\phi_0} \right)^{1/2} X P\tag{2.43}$$

integrando entre el punto objeto y el imagen y teniendo en cuenta que al ser $\varepsilon(z_0) = 0$, $X(z_0) = 0$ el valor de $B(z_0)$ es nulo también, se tiene para la aberración esférica

$$|w| = \frac{\alpha^3 Y(z_i)}{\sqrt{\phi_0}} \int_{z_0}^{z_i} X \sqrt{\phi} P dz\tag{2.44}$$

A fin de relacionar w con las magnitudes que definimos anteriormente al estudiar la

aberración introducimos un diafragma de radio R en la región de campo nulo para limitar la apertura del haz. Si la distancia entre z_0 y el diafragma es τ se tendrá $R = \alpha \tau$; ya que $|w| = AR^3$ y por otra parte al ser $Y(z_0) = 1$, $Y(z_i)$ representa el aumento lateral M , podemos expresar el coeficiente de aberración A en la forma

$$A = \frac{M}{\tau^3 \sqrt{\phi_0}} \int_{z_0}^{z_i} X^4 \sqrt{\phi} \left\{ \frac{1}{32} \frac{\phi^{IV}}{\phi} - \frac{1}{16} \left(\frac{\phi''}{\phi} \right)^2 + \frac{1}{8} \left(\frac{\phi'''}{\phi} - \frac{\phi' \phi''}{\phi^2} \right) \frac{X'}{X} - \right. \\ \left. \frac{1}{4} \frac{\phi''}{\phi} \left(\frac{X'}{X} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\phi'}{\phi} \left(\frac{X'}{X} \right)^3 \right\} dz \quad (2.45)$$

integrando por partes pueden eliminarse términos en ϕ''' , ϕ'' y ϕ' quedando finalmente

$$A = \frac{M}{\tau^3 \sqrt{\phi_0}} \int_{z_0}^{z_i} X^4 \sqrt{\phi} \left\{ \frac{1}{32} \frac{\phi^{IV}}{\phi} - \frac{1}{32} \left(\frac{\phi''}{\phi} \right)^2 - \frac{1}{4} \frac{\phi''}{\phi} \left(\frac{X'}{X} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{X'}{X} \right)^4 \right\} dz \quad (2.46)$$

Con frecuencia se emplea un coeficiente de aberración C_s , definido mediante la relación

$$|w| = MC_s \alpha^3 \quad (2.47)$$

Es inmediato ver que $C_s = \frac{R^3 A}{M \alpha^3}$ y por tanto se puede calcular a partir de (2.46); sin

embargo puede usarse otra expresión más simple que no contiene términos en ϕ^{IV} [18].

$$C_s = \frac{1}{64 \sqrt{\phi_0}} \int_{z_0}^{z_i} X^4 \sqrt{\phi} \left\{ \left(3T^4 - \frac{9}{2} T^2 T' + 5T'^2 \right) + 4T T' \frac{X'}{X} \right\} dz \quad (2.48)$$

en donde se ha introducido la función $T(z) = \frac{\phi'}{\phi}$ y su derivada $T'(z)$. Para caracterizar

la aberración esférica de las lentes es mucho más frecuente utilizar el coeficiente C_s

obtenido a partir de una modificación de (2.48) en la que se sustituye el rayo normal X por el rayo reducido X_R definido en la ecuación (2.7), quedando C_s en la forma

$$C_s = \frac{1}{64\sqrt{\phi_0}} \int_{z_0}^{z_l} \frac{1}{\sqrt{\phi}} \left\{ X_R^4 \left(3T^4 + 5T'^2 - \frac{11}{2}T^2T' \right) + 4X_R^4 X_R' T T' \right\} dz \quad (2.49)$$

Esta fórmula tiene la ventaja de que permite obtener C_s al mismo tiempo que otros parámetros de la lente como las distancias focales y las distancias focales medias. Es posible expresar este coeficiente como un polinomio de cuarto orden en función de la desmagnificación \mathcal{D} [19]:

$$C_s = C_{s0} + C_{s1}\mathcal{D} + C_{s2}\mathcal{D}^2 + C_{s3}\mathcal{D}^3 + C_{s4}\mathcal{D}^4 \quad (2.50)$$

Los coeficientes C_{si} no dependen de la posición del punto objeto por lo cual son los que generalmente se dan en las tablas.

Destacar, por último, que se ha demostrado que en el rango de polarizaciones en el que la lente no es extremadamente fuerte, todos los coeficientes de aberración geométrica están interrelacionados a través de funciones muy sencillas que dependen del cociente entre los potenciales de entrada y salida de la lente [20,21]. Por tanto, en el rango de interés es posible minimizar todos los coeficientes simultáneamente.

2.3 Lente de dos cilindros: comparación entre las aproximaciones analítica y numérica

Comenzaremos el estudio de las lentes multi-cilindro analizando en detalle la configuración básica, es decir, la que consta de dos cilindros. Cualquier otra lente se puede formar por sucesivas combinaciones de esta unidad básica. Hemos visto que para incluir efectos de primer orden en lentes con simetría rotacional es preciso conocer el

potencial en el eje y sus dos primeras derivadas. Por tanto vamos a presentar un análisis comparativo de estas funciones obtenidas a partir de las aproximaciones analítica (Modelo de Dymnikov) y numérica (BEM).

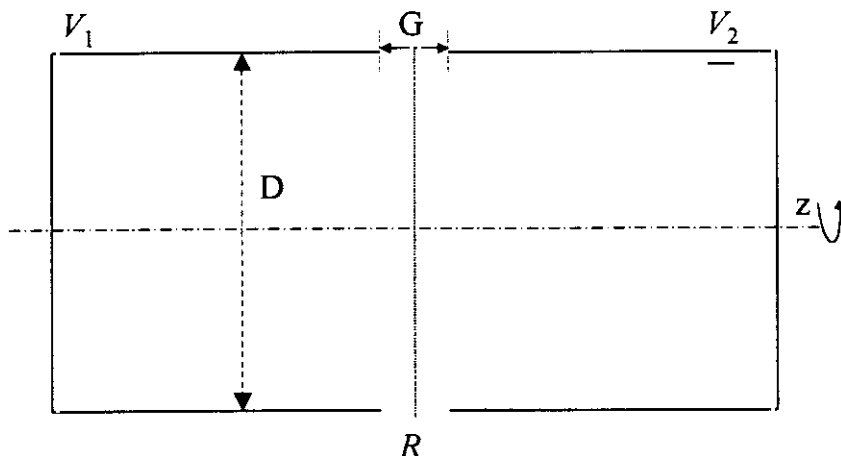


Figura 2.2 Diagrama esquemático de una lente de dos cilindros.

La Figura 2.2 muestra la geometría de esta configuración. Para el caso en que $\frac{G}{D} \ll 1$ existen diversas aproximaciones analíticas que dan el potencial en el eje con un error prácticamente despreciable; para una separación arbitraria también se han dado fórmulas analíticas con uno o más parámetros ajustables a fin de acercarse lo más posible al potencial real (para una discusión detallada véase el Cap. 35 de la referencia [2]). En el modelo de Dymnikov el potencial axial en torno al plano medio R , se representa mediante un polinomio de grado noveno con condiciones sobre dicha función y sus cuatro derivadas en los extremos, de forma que el potencial es constante en ellos y las derivadas nulas. De esta forma se conecta adecuadamente con las regiones en las que el potencial se representa por una constante, $\phi(z) = V_1$ ó $\phi(z) = V_2$. Las ecuaciones completas se dan en el Apéndice A1. En la Figura 2.3 se ha dibujado esta función para

la ecuación (A1.1) con $V = 1$, así como su derivada segunda con respecto a la variable axial. Observemos que las gráficas presentan una antisimetría con respecto al plano medio.

La solución numérica de este problema ya se abordó en el capítulo anterior. Sabemos que una vez fijada la geometría y los potenciales de polarización es inmediato

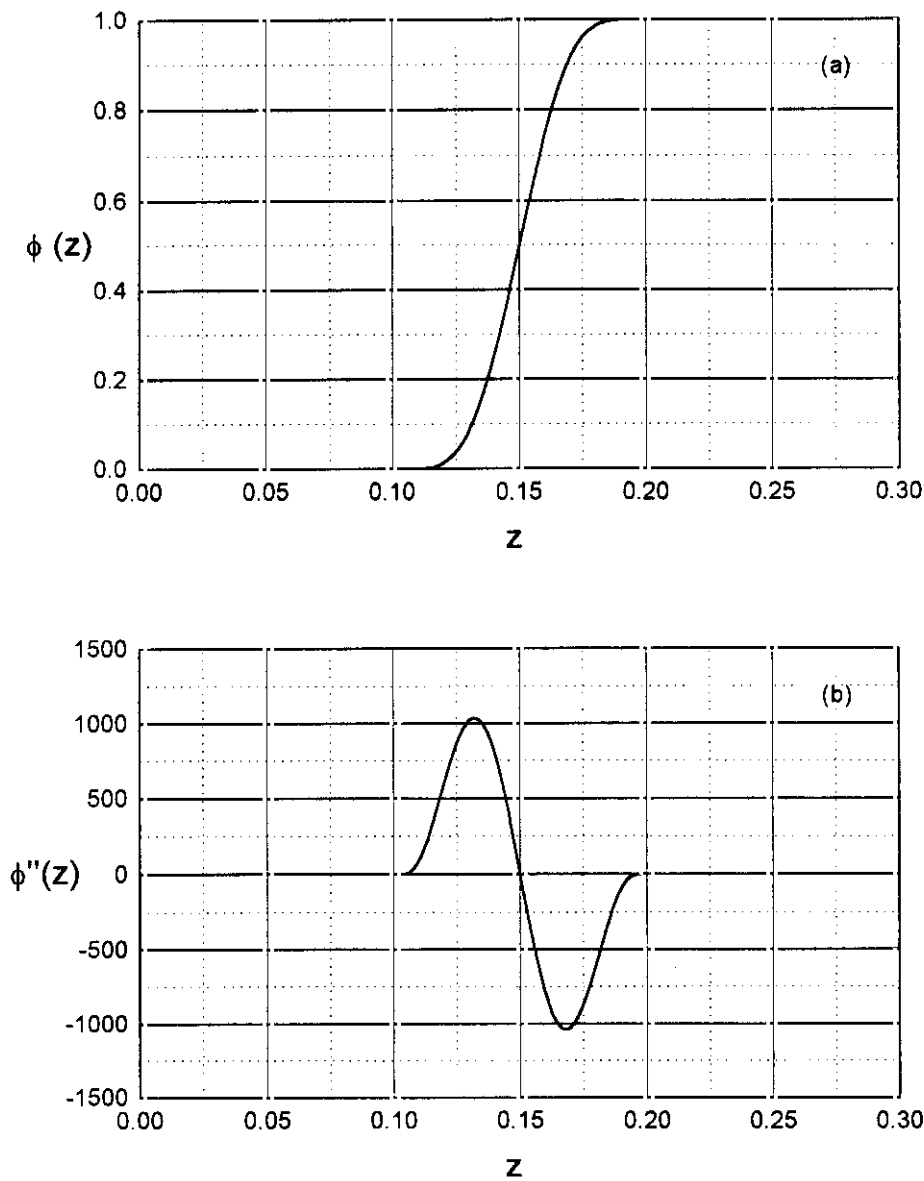


Figura 2.3 *Distribución del potencial axial $\phi(z)$ y de su derivada segunda obtenidas de la aproximación analítica de Dymnikov con $V=1$, $l_f = 9.5$ y $l_p = 12.5$.*

conocer la distribución de carga sobre los conductores y la distribución de potencial en cualquier punto de interés. Las expresiones para calcular $\phi(z)$ y sus derivadas a lo largo del eje son particularmente sencillas lo que permite calcular con un buen grado de aproximación [22]. La Figura 2.4 ilustra el comportamiento del potencial axial y su derivada segunda para el caso $G/D = 0.625$, $V_1 = 0$ V, $V_2 = 1$ V.

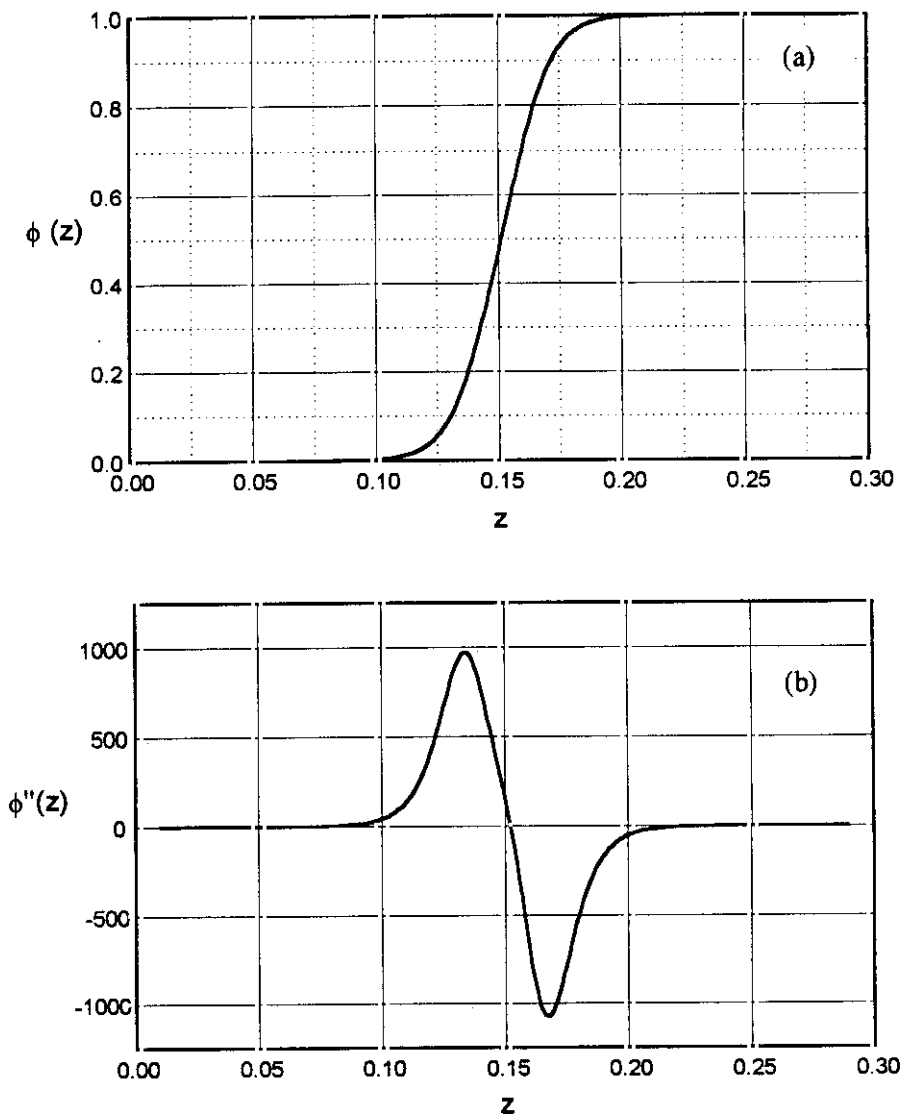


Figura 2.4 Distribución del potencial axial numérico y de su derivada segunda. $G/D = 0.625$, $V_1 = 0$ V, $V_2 = 1$ V.

Es importante destacar que en este caso la antisimetría de las funciones no es perfecta; ello es debido a que en una solución del tipo *BEM* está implícita la existencia

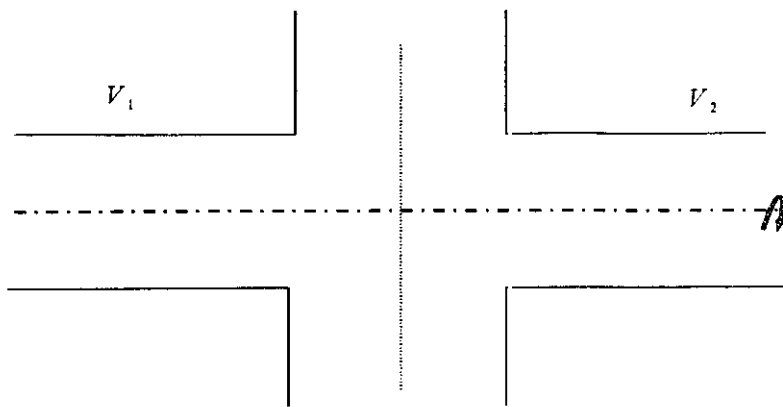


Figura 2.5 Diagrama esquemático de la lente con apantallamiento.

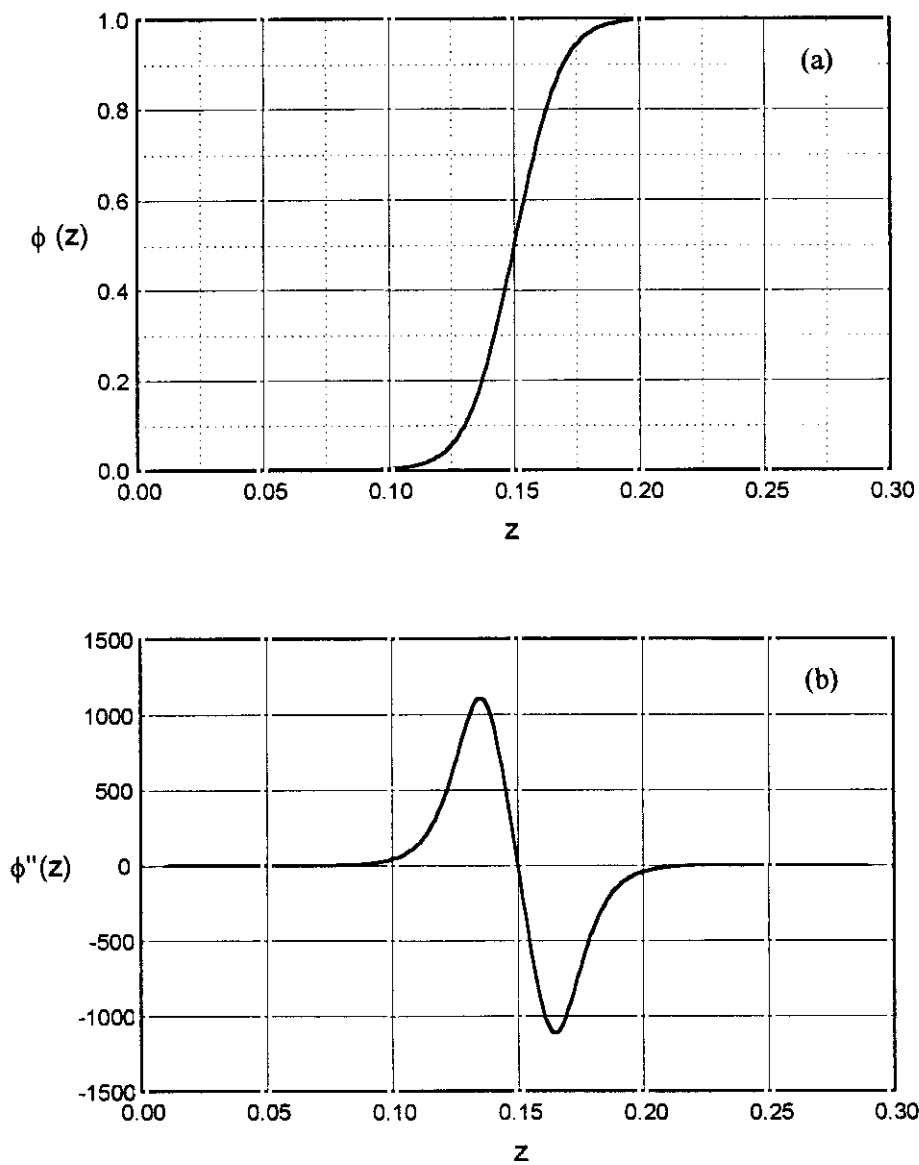


Figura 2.6 Distribución del potencial axial numérico y de su derivada segunda con apantallamiento. $G/D = 0.625$, $V_1 = 0V$, $V_2 = 1V$, $R_{ap}/D = 1.625$.

de un contorno esférico con radio infinito y a potencial nulo como se desprende de la ecuación (1.10). Por tanto este potencial de referencia penetrará en la lente provocando esta ligera perturbación. Únicamente en el caso $V_1 = -V_2$ se tendría una representación completamente equivalente a la dada por la aproximación analítica. Si, como en el caso del acelerador a 150 kV, las diferencias de potencial que se establecen son elevadas, esta influencia puede ser tan grande que imposibilite la síntesis.

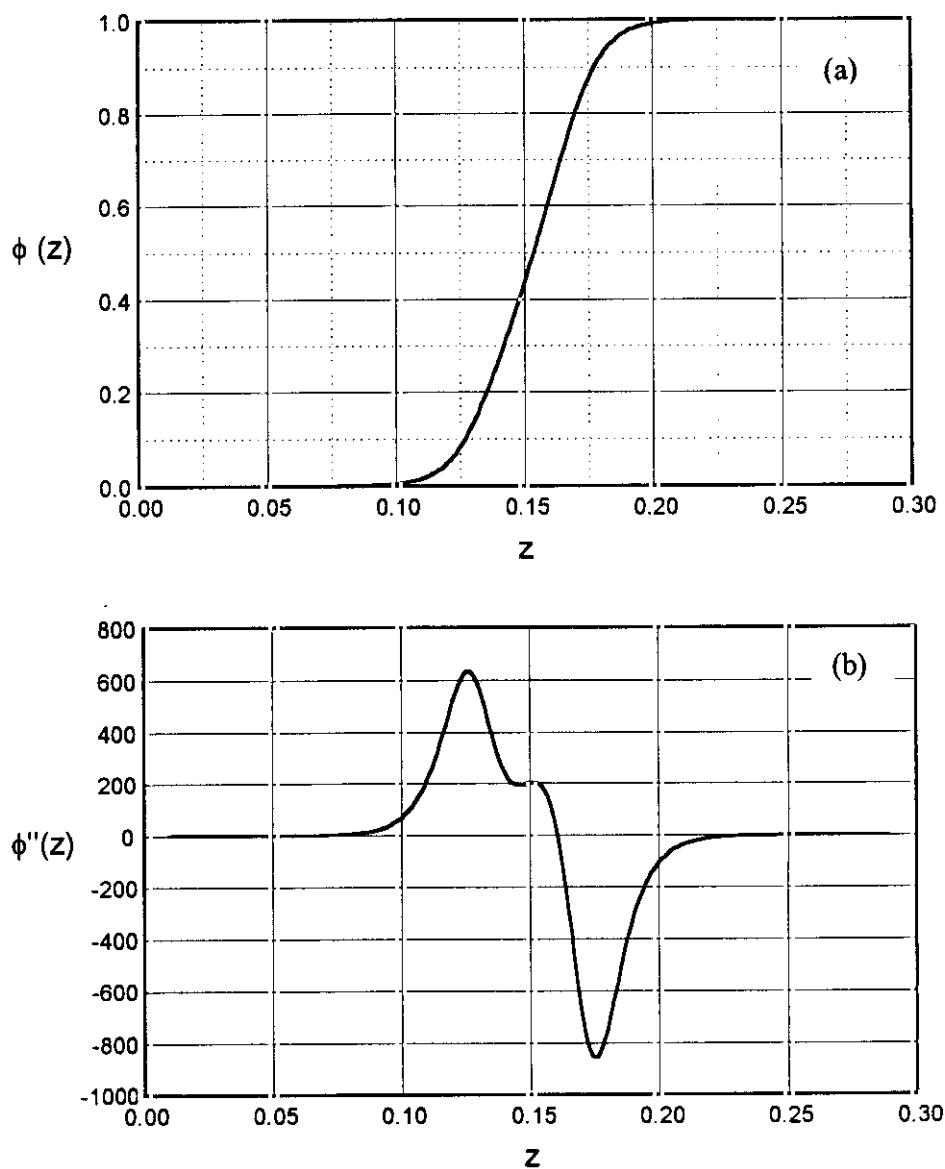


Figura 2.7 Distribución axial del potencial numérico y su derivada segunda. $G/D = 1$.

Una solución a este problema consiste en añadir unos electrodos que apantallen la región de la lente con respecto al potencial de tierra. La Figura 2.5 muestra una de las configuraciones más sencillas que hemos estudiado. A los cilindros se les ha añadido unos electrodos en forma de corona circular; si el radio exterior de la corona, R_{ap} , es

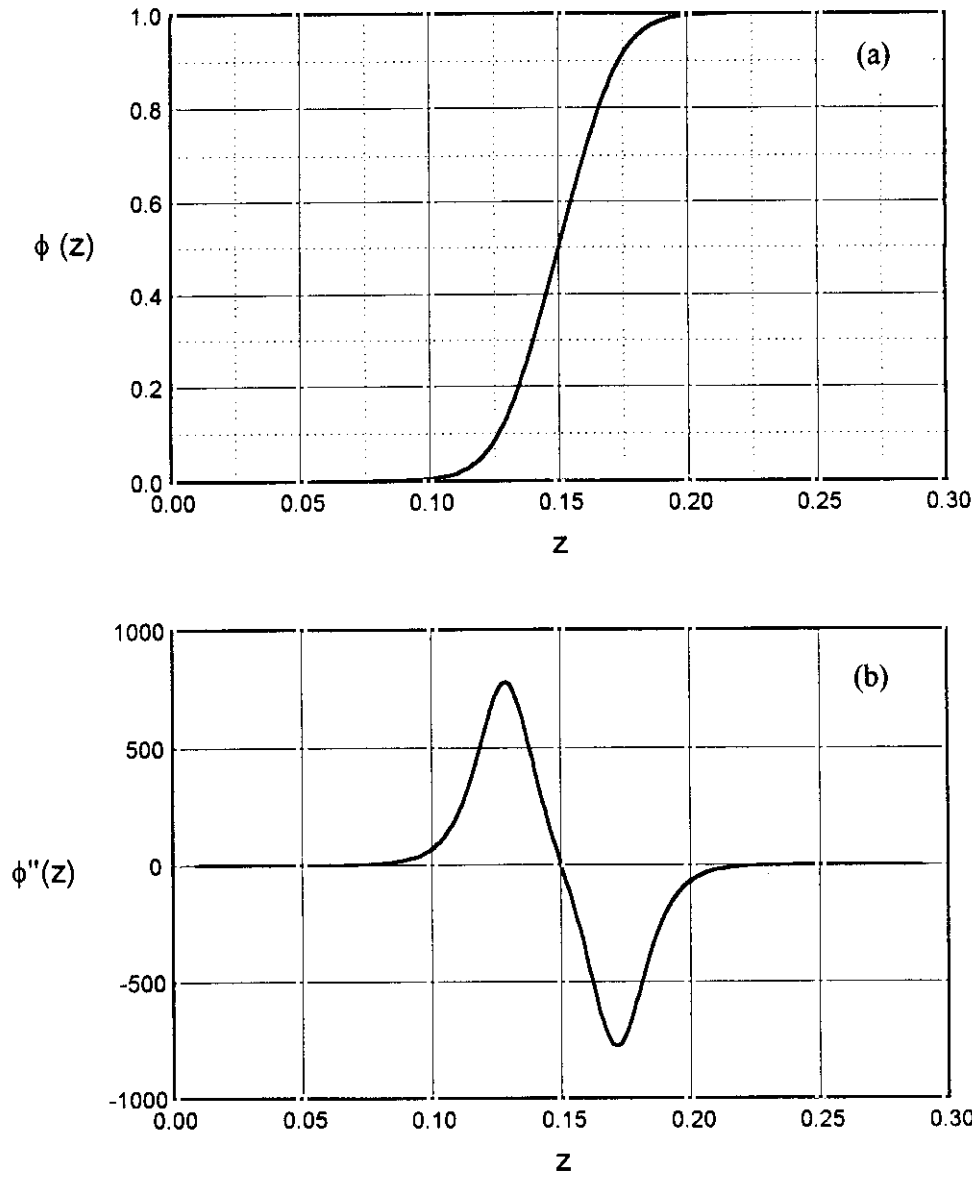


Figura 2.8 *Distribución del potencial axial y su segunda derivada. $G/D = 1$, $R_{ap}/D = 2$.*

suficientemente grande se evitará la distorsión. La Figura 2.6 muestra el comportamiento del potencial axial y su derivada segunda que, como era de esperar, han

recuperado el comportamiento antisimétrico. Si la separación entre los electrodos aumenta la distorsión de las funciones es aun mayor, pero siempre es posible recuperar la antisimetría aumentando el radio de apantallamiento como se muestran en las Figuras 2.7 y 2.8. Una alternativa consiste en añadir a los cilindros pantallas de superficie cónica que se vayan aproximando a medida que su distancia al eje aumenta; de esta forma constituyen un blindaje más eficiente que el anterior. Sin embargo desde el punto de vista numérico el tratamiento es más complicado y sólo en el caso de diferencias de potencial de orden de MV sería interesante su utilización.

2.4 Diseño optimizado de una lente *einzel* de tres cilindros

Los cálculos puestos a punto nos permiten abordar cualquier configuración de lentes con simetría rotacional. Sin perder de vista esa posibilidad vamos a centrarnos esta sección en el diseño de la denominada lente *einzel* de tres cilindros. Esta lente se encuentra con frecuencia en los osciloscopios, sondas de iones, microscopios electrónicos, etc., por lo que nos pareció interesante su análisis. Además nos da pie para ilustrar de una manera sencilla el procedimiento de optimización base de todo nuestro estudio. Las energías consideradas permiten un tratamiento no relativista con lo que los resultados son aplicables a todo tipo de partículas con la salvedad de que las polarizaciones deben cambiar de signo según se trate de partículas con carga positiva o negativa.

La Figura 2.9 muestra la configuración típica de un sistema de enfoque incluyendo un conjunto de dos aperturas y la lente de tres cilindros. Estas dos aperturas configuran el perfil de haz antes de ser enfocado y, como veremos más adelante, juegan un papel esencial en la optimización. Las cantidades que definen la geometría son:

- a) Los radios de las aperturas r_1, r_2 y la separación entre ambas l_{12} .

- b) La longitud del primer y tercer cilindro l_{c1} , la del central l_{c2} y la separación entre ellos G .
- c) El radio de los cilindros de la lente r_c –que supondremos igual para todos ellos– y del conductor exterior r_{ex} .
- d) La longitud total del sistema $l_t = l_a + l_b$.
- e) La distancia entre el final de la lente y el blanco (*working distance*) g .

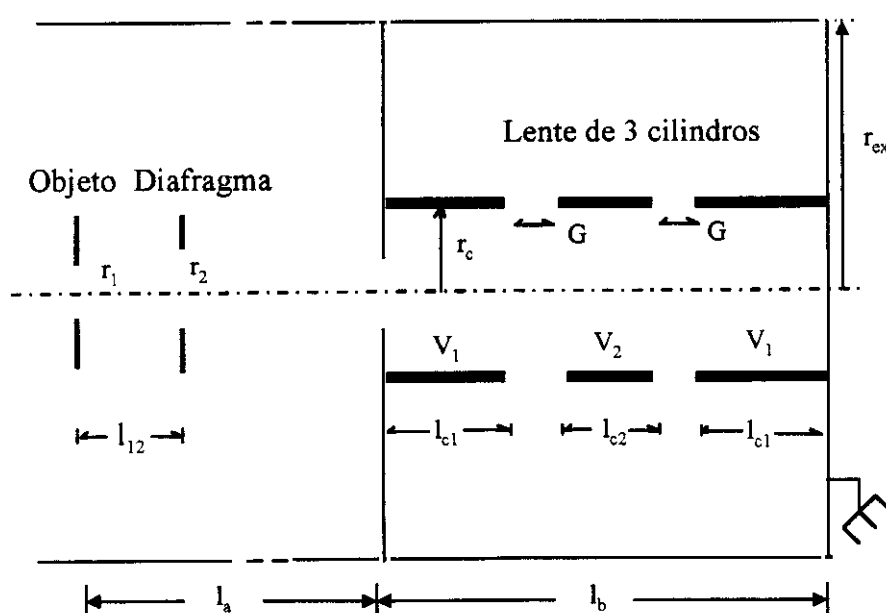


Figura 2.9 Diagrama esquemático de un sistema de enfoque incluyendo las aperturas de modelado del haz y una lente einzel. El plano imagen donde se sitúa el blanco se encuentra al final del tercer electrodo.

Tanto las aperturas como el primer y tercer cilindro están conectados a tierra, junto con el tubo exterior que rodea todo el sistema. El único potencial variable es el del electrodo central V_2 . Así que las partículas no modifican su energía al recorrer esta región, sólo son enfocadas. De ahí el nombre de lente unipotencial o lente *einzel*. Se supone también que las partículas han sido previamente aceleradas a través de una diferencia de potencial prefijada y filtradas en energías.

2.4.1 Diseño del sistema y conexión con el modelo de Dymnikov

La primera etapa en el diseño es fijar unas condiciones de trabajo. Para este caso se han definido las siguientes: energía del haz $K = 30 \text{ kV}$; condición estigmática equivalente a imponer $R_{12} = 0$, es decir una partícula que corta el eje en la posición del objeto vuelve a cortarlo, después de atravesar la lente, en el plano imagen; distancia focal imagen $f_i = -\frac{1}{R_{21}} = 0.284 \text{ m}$; desmagnificación $\mathcal{D} = \frac{1}{R_{11}} = -26.16$; longitud total $l_t = 8 \text{ m}$ y distancia de trabajo $g = 20 \text{ cm}$. Llevadas estas condiciones al modelo de Dymnikov conducen a unos valores concretos de los parámetros de ajuste en la aproximación analítica del potencial; en este caso $l_f = 8 \text{ cm}$ y $l_p = 2 \text{ cm}$.

La simulación numérica comienza generando la geometría de la lente representada en la Figura 2.9. Dada la simetría en la polarización de los electrodos no es necesario incluir apantallamiento en ella. Ignorando la región de las aperturas en la que el potencial y el campo son nulos, el resto del sistema se subdivide en 264 subáreas. Aplicando la técnica de elementos de contorno que hemos estudiado en el capítulo anterior, se puede resolver el problema electrostático e integrar las dos trayectorias que calculan los coeficientes de la matriz de transferencia. Las variables geométricas utilizadas como parámetros de ajuste son el radio de los cilindros, la separación entre ellos y la longitud del cilindro central. Como variable eléctrica se tiene el potencial V_2 . Hemos encontrado que la síntesis no es única, es decir que distintas combinaciones de r_c , G y l_{c2} reproducen las condiciones de trabajo fijadas. La Figura 2.10 muestra la distribución de potencial debida a dos de las posibles geometrías. Se ve que en ambos casos la coincidencia entre la aproximación analítica y el potencial numérico es excelente y permite una concordancia muy buena entre los parámetros de la matriz de

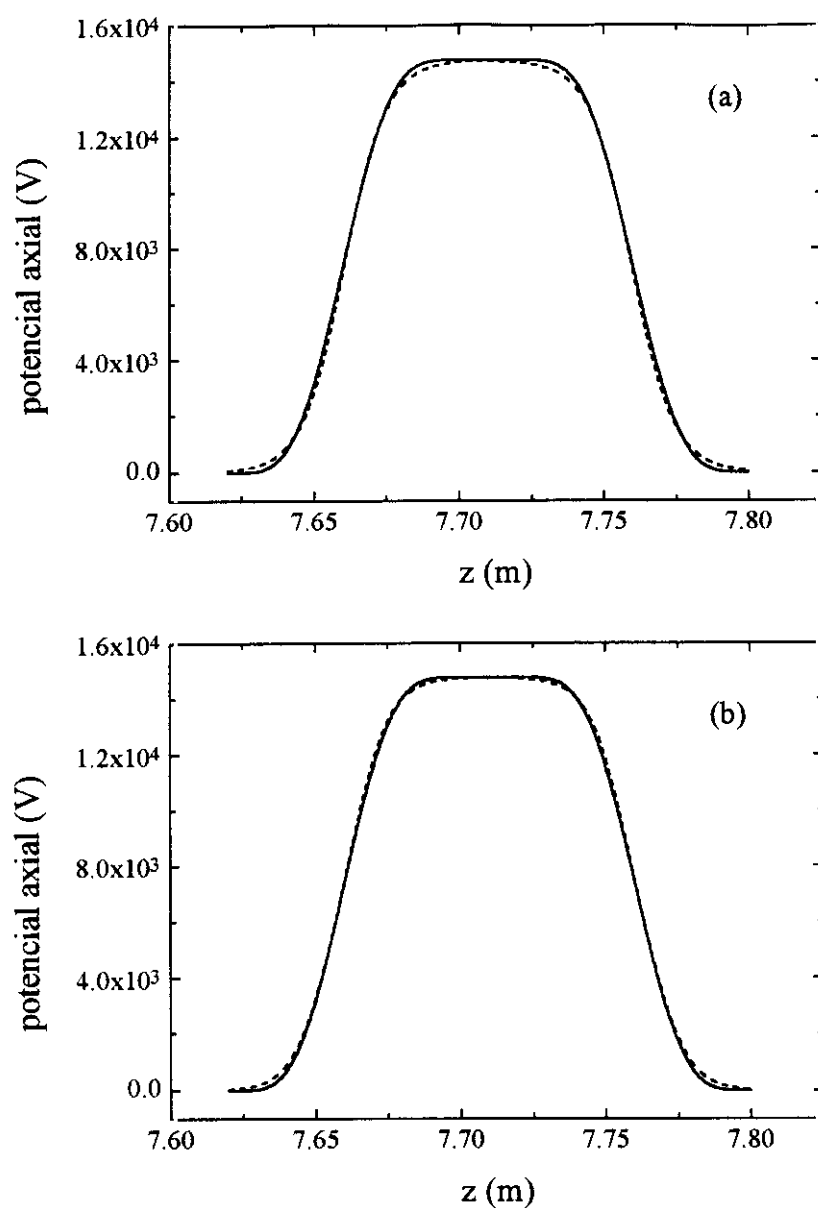


Figura 2.10 Potencial axial calculado mediante la aproximación analítica (línea continua) y el modelo numérico (línea de trazos); el origen se toma en el plano objeto. $l_t = 8m$, $l_a = 7.42m$, $g = 20cm$, $r_{ex} = 10cm$, $l_f = 8cm$ y $l_p = 2cm$. $V_2 = 14.766kV$. (a) $r_c = 1.8cm$, $G = 1cm$, $l_{c2} = 9cm$. (b) $r_c = 1.52cm$, $G = 2cm$, $l_{c2} = 8.4cm$.

transferencia obtenidos por ambos modelos. En la Tabla 2.1 se comparan estos valores para las tres situaciones.

Salvo para el coeficiente R_{12} , cuyos valores quedan dentro del error inherente al método de cálculo, los resultados de la Tabla 2.1 muestran una coincidencia casi total de

la lente (a) con la aproximación analítica y diferencias inferiores al 0.12% en el caso de la lente (b). Estas diferencias no dan variaciones perceptibles en las imágenes que resultan del proceso de optimización.

	R_{11}	$R_{12} (m)$	$R_{21} (m^{-1})$	R_{22}
Aprox. Dymnikov	-0.0382	6.2×10^{-10}	-3.5206	-26.161
Lente (a)	-0.0382	-8.4×10^{-8}	-3.5208	-26.162
Lente (b)	-0.0382	7.4×10^{-7}	-3.5246	-26.190

Tabla 2.1 *Coefficientes de la matriz de transferencia obtenidos en la aproximación analítica y en las dos lentes equivalentes sintetizadas con el modelo numérico.*

Vamos a mostrar a continuación cómo minimizar las aberraciones de tercer orden en estos sistemas.

2.4.2 Optimización mediante el modelado del haz

El proceso de optimización está basado en el análisis de una figura de mérito característica del sistema representado en la Figura 2.9. Para ello se simula el comportamiento del haz mediante un conjunto de cargas cuyas trayectorias se calculan desde el plano objeto hasta el plano imagen. En el área definida por la apertura objeto se distribuyen N partículas con posiciones (x_{0j}, y_{0j}) generadas aleatoriamente y con velocidades transversales (v_{x0j}, v_{y0j}) generadas también de manera aleatoria y de forma que proyectan el haz en la segunda apertura como veremos más adelante. La velocidad axial viene impuesta por el potencial acelerador (30 kV en nuestro caso).

Todo ello determina las condiciones iniciales para calcular la trayectoria que seguirá cada partícula de acuerdo con la ecuación (1.22). El método de Dormand-Prince de 5° orden ha resultado ser el más eficiente para la integración numérica de (1.22) y es el que se ha utilizado aquí. Este conjunto de trayectorias da lugar en el plano del blanco a N puntos (x_{ij}, y_{ij}) –el *spot* imagen– que representan la imagen de los puntos objeto. El tamaño del *spot* se puede estimar definiendo una cantidad que representa el valor medio de la distancia de estos puntos al eje,

$$\rho_{av} = \frac{\sum_{j=1}^N \sqrt{x_{ij}^2 + y_{ij}^2}}{N} \quad (2.51)$$

Así, consideraremos que un *spot* es óptimo cuando su radio promedio, ρ_{av} , sea el más pequeño de todos los calculados.

Además de las condiciones de trabajo mencionadas anteriormente, referidas a las características del sistema, hay que considerar una última referida al haz que se quiere enfocar. De la totalidad de las partículas que llegan del acelerador, se selecciona una porción mas o menos grande y que se define como la *emitancia* del haz. En función de las dos aperturas de entrada y de su separación, esta cantidad viene dada por:

$$em = \frac{r_1 r_2}{l_{12}} \quad (2.52)$$

Notemos que una vez que se fija el valor de la emitancia para un experimento concreto, dos de las tres variables que intervienen en su definición pueden modificarse a voluntad.

Utilizando el dato de la emitancia y eligiendo como parámetros r_1 y l_{12} , podemos detallar ahora cómo se definen las posiciones y velocidades transversales en el plano objeto. Para cada trayectoria se comienza llamando a una subrutina de números

aleatorios que suministra cuatro cantidades, $ranx$, $ranv$, $ranvx$, $ranvy$, entre -1 y $+1$; a continuación se obtienen las posiciones y pendientes iniciales mediante las ecuaciones:

$$x_0 = r_1 \cdot ranx, \quad x'_0 = \frac{em \cdot ranvx}{r_1} - \frac{x_0}{l_{12}}; \quad y_0 = r_1 \cdot ranv, \quad y'_0 = \frac{em \cdot ranvy}{r_1} - \frac{y_0}{l_{12}} \quad (2.53)$$

Las diferentes combinaciones de r_1, r_2 y l_{12} representan, para una misma emitancia, diferentes formas de modelar el haz antes de ser enfocado. Las simulaciones muestran que el *spot* imagen depende de manera significativa de la elección de este conjunto de parámetros y que para uno de ellos el valor de ρ_{av} es mínimo.

La búsqueda del mínimo nos llevaría a computar cientos de *spots* y, aunque el tiempo de cálculo requerido estaría dentro de nuestras posibilidades de computación, hemos hecho uso de los resultados que proporciona el modelo de Dymnikov. Al haber efectuado una equivalencia entre los dos modelos, como nos asegura la Tabla 2.1, sus resultados deberán ser trasladables a nuestra síntesis, como así hemos comprobado. La ventaja es que el tiempo en su caso se reduce enormemente puesto que el cálculo del campo se hace utilizando expresiones analíticas.

El proceso de optimización descrito se ilustra en la Figura 2.11. En ella se muestran tres *spots* calculados para una emitancia $em = 10^{-9} m$ y las condiciones de trabajo definidas anteriormente. El modelo de Dymnikov proporciona los parámetros $r_{1op} = 1.39 \times 10^{-5} m$, $l_{12op} = 0.342 m$. Utilizando estos datos, hemos computado con nuestro modelo $N = 1500$ trayectorias que dan el *spot* óptimo 2.11 (a). Se ve que está constituido por la imagen gaussiana más un pequeño halo alrededor conteniendo aproximadamente un 3% del total de partículas. Este halo representa la contribución de efecto de las aberraciones de tercer orden reducido al mínimo. Para comprobarlo hemos variado los parámetros de la optimización. En la Figura 2.11 (b) las condiciones

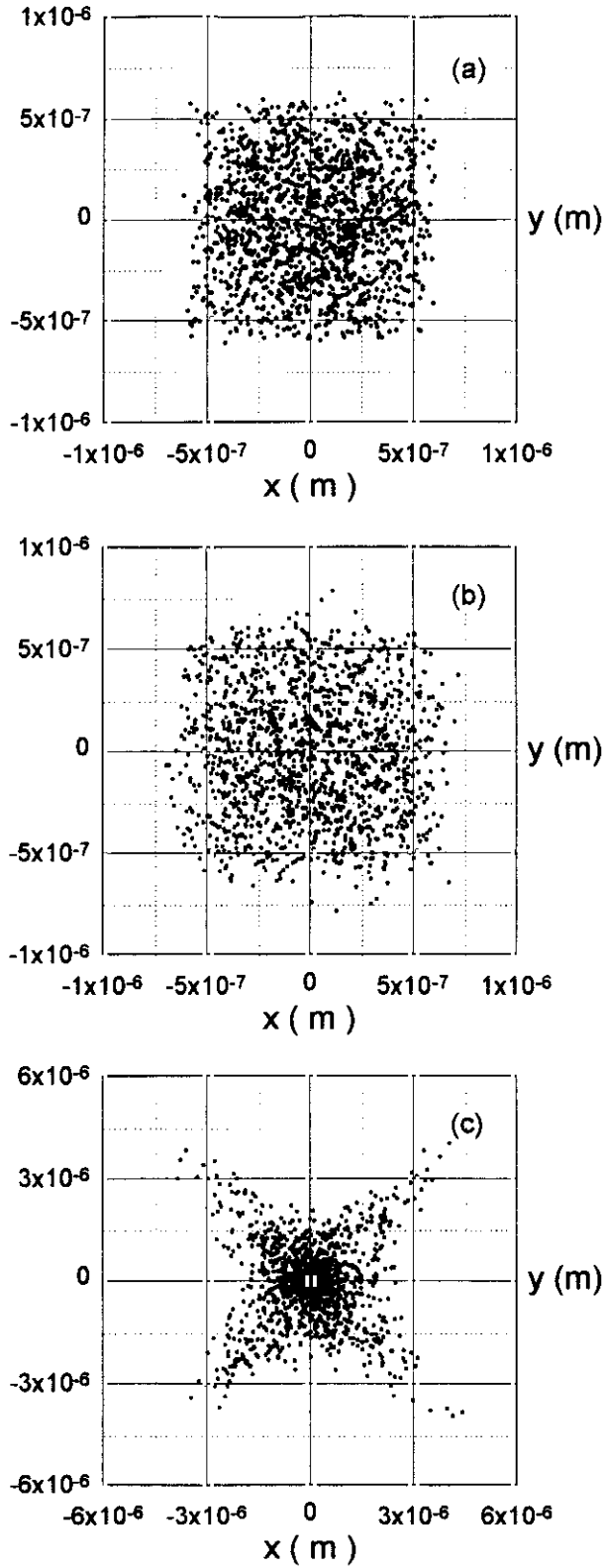


Figura 2.11 Spots producidos por la lente einzel en el plano imagen para distintas combinaciones de los parámetros de las aperturas. (a) $r_1 = r_{1op}$, $l_{12} = l_{12op}$. (b) $r_1 = r_{1op}$, $l_{12} = 2 \times l_{12op}$. (c) $r_1 = r_{1op} / 2$, $l_{12} = l_{12op}$. $em = 10^{-9} m$.

iniciales se han fijado con $l_{12} = 2 \times l_{12op}$, $r_1 = r_{1op}$, $r_2 = 2 \times r_{2op}$ que dejan invariable la emitancia, pero el tamaño del *spot* ha aumentado. La Figura 2.11 (c) se ha obtenido para $l_{12} = l_{12op}$, $r_1 = 2 \times r_{1op}$, $r_2 = r_{2op}/2$; ahora el efecto es más dramático ya que aumenta notablemente el tamaño del haz y además se ha producido una gran distorsión.

Es difícil imaginar que una idea tan simple como la propuesta por el Prof. Dymnikov pueda tener las implicaciones que aquí hemos mostrado: como alternativa a los sistemas correctores que suelen añadirse a las lentes y que en general complican el diseño del sistema, se presenta el concepto de modelado del haz antes de su enfoque. De tal forma que de todas las trayectorias del haz se van a seleccionar las que mejor se comportan al atravesar la lente; y esto se consigue con la elección adecuada de la geometría del par de rendijas colocadas delante de la lente. Aunque se ha comprobado experimentalmente con sistemas cuadrupolares magnéticos, esta es la primera vez que se muestra mediante unos cálculos muy rigurosos que la propuesta es válida.

$em(m)$	10^{-9}	10^{-8}	10^{-7}	10^{-6}
$r_{1op}(\mu m)$	13.9	78.0	44.3×10^1	25.0×10^2
$l_{12op}(m)$	0.342	0.997	2.386	4.530
$\rho_{av}(\mu m)$	0.370	2.080	11.42	64.60
	0.366	2.058	11.32	64.10
$r_{max}(mm)$	1.170	2.075	3.846	7.070
	1.173	2.080	3.857	7.070

Tabla 2.2 *Parámetros de optimización, radio promedio y anchura máxima del haz en función de la emitancia. En las dos últimas filas las cantidades superiores corresponden a la lente (a) y las inferiores a la lente (b).*

La simulación se ha extendido al diseño optimizado para otros valores de la emitancia. La Tabla 2.2 muestra los parámetros de la optimización, el valor del radio promedio del *spot* imagen y la máxima separación r_{max} del eje medida a lo largo de la integración de las trayectorias en cada caso.

Las pequeñas diferencias tabuladas para las lentes (a) y (b) son prácticamente inapreciables en los *spots*.

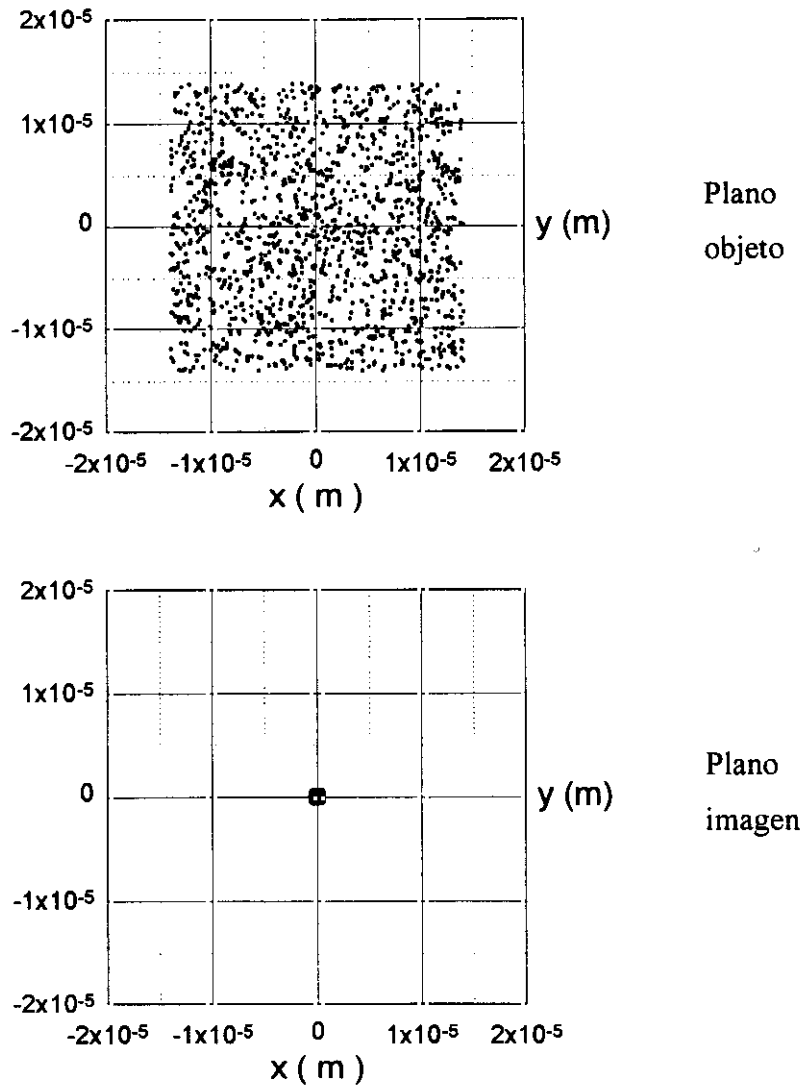


Figura 2.12 *Síntesis optimizada de una lente einzel: tamaño de la imagen = tamaño del objeto / desmagnificación + 3% de halo. $em = 10^{-9} m$.*

En resumen, el proceso de diseño optimizado se realiza en las siguientes etapas:

- a) Elección de unas condiciones de trabajo adecuadas al posible experimento en el que se va incluir la lente.
- b) Determinación en el modelo de Dymnikov de los parámetros que ajustan las funciones representativas del potencial y sus derivadas a las condiciones fijadas.
- c) Cálculo de la geometría óptima de las aperturas que modelan el haz y producen un *spot* imagen de tamaño mínimo.
- d) Conexión del modelo de Dymnikov con la simulación numérica que permite la síntesis de la lente en estudio. Los potenciales obtenidos mediante aproximaciones analíticas se hacen corresponder a los generados por cilindros conductores con una geometría concreta.
- e) Caracterización del comportamiento de la lente mediante simulación de un conjunto de trayectorias cuya condiciones iniciales se fijan a partir de los datos suministrados en el apartado c).

La figura 2.12 muestra el resultado conseguido al aplicar este proceso a las condiciones impuestas en el caso de la lente *einzel* que hemos estudiado.

2.5 Diseño optimizado de una lente aceleradora a 150 kV

En esta sección vamos a aplicar el proceso de optimización desarrollado anteriormente al diseño de una lente aceleradora con una desmagnificación elevada. Se trata de un dispositivo de construcción muy sencilla, que se puede clasificar como un acelerador lineal DC o del tipo Cockcroft-Walton [3].

Esta clase de lentes se utiliza en general en todos aquellos experimentos para los que se requieren haces de partículas cargadas a esta energía, de baja densidad de corriente, y afectados de una aberración mínima que permitan una gran resolución angular. En particular este sistema se ha diseñado con vistas a su utilización en

experimentos de medida de las secciones eficaces de interacción de electrones con materiales equivalentes a tejido, dentro de un proyecto sobre tecnología de materiales.

En la Figura 2.13 se ha representado el diagrama de bloques de una microsonda para electrones con un sistema de generación y extracción a 5 kV, dos aperturas para modelar el haz y la lente aceleradora. Cambiando el signo de las polarizaciones se tendría una microsonda para protones.

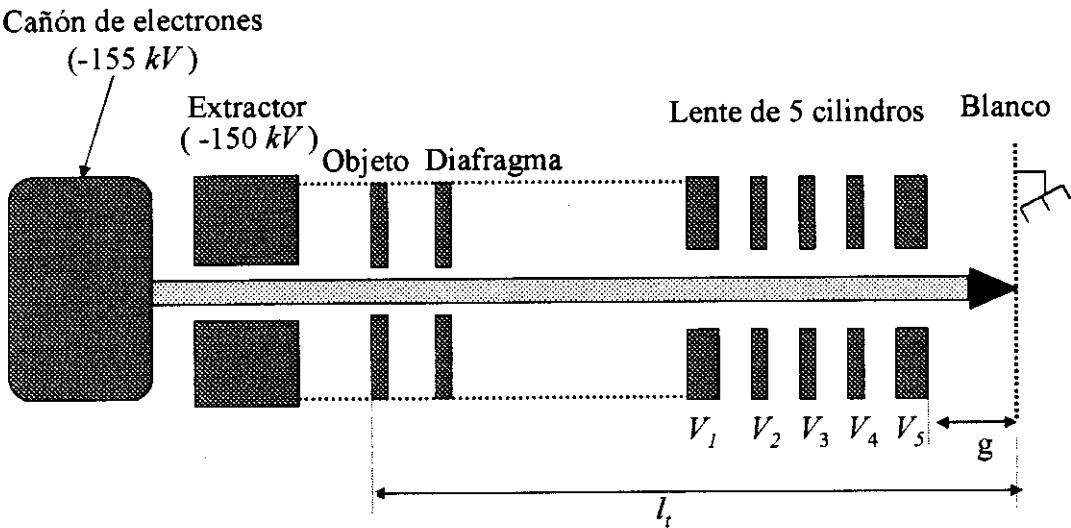


Figura 2.13 Diagrama esquemático de una microsonda de electrones.

Las etapas a seguir son las mismas que hemos visto para la lente *einzel* y se describirán brevemente, haciendo hincapié en las pequeñas diferencias que han surgido al abordar este diseño. El sistema consta ahora de cinco cilindros siendo las longitudes del primero y del quinto l_{c1} y la de los restantes l_{c2} , el radio r_c será igual para todos ellos así como la separación entre los mismos, G . Con respecto a las polarizaciones, se mantienen constantes excepto la del tercer electrodo que se deja como parámetro de ajuste: $V_1 = -150 kV$, $V_2 = -75 kV$, $V_4 = -75 kV$ y $V_5 = 0V$. Las restantes variables se definen de igual forma que en la Figura 2.9.

2.5.1 Diseño y conexión con el modelo de Dymnikov

Las condiciones de trabajo especificadas en este caso son las siguientes: energía del haz de electrones $K = 5kV$; condición estigmática, $R_{12} = 0$; distancia focal imagen

$$f_i = -\frac{p(z_i)}{p(z_0)} \frac{1}{R_{21}} = -0.328m; \text{ desmagnificación } \mathcal{D} = \frac{1}{R_{11}} = 41.38; \text{ longitud total}$$

$l_t = 3m$ y distancia de trabajo $g = 10cm$. Llevadas estas condiciones al modelo de Dymnikov conducen a los parámetros de ajuste en la aproximación analítica de potencial $l_f = 8cm$ y $l_p = 2cm$.

Al intentar reproducir estos valores de diseño con el modelo numérico nos encontramos con la dificultad mencionada anteriormente. La penetración del potencial de tierra distorsiona notablemente la distribución del potencial axial hasta el punto de que es imposible igualar todos los coeficientes de la matriz de transferencia simultáneamente. La solución se encontró añadiendo en los bordes de los cilindros pantallas en forma de corona circular con radio interior r_c y radio exterior $r_{ex} = 5cm$. La división de la lente en pequeñas subáreas nos lleva a plantear un sistema de 320 ecuaciones, cuya resolución da la distribución aproximada de carga sobre los conductores, una vez que se establezcan sus polarizaciones. En el proceso de síntesis se ha dejado fijas las longitudes de los cilindros $l_{c1} = 14cm$, $l_{c2} = 8cm$, la separación entre ellos $G = 2cm$, y las polarizaciones de todos los electrodos excepto la del tercero. Variando el potencial V_3 y el radio de los cilindros r_c se consigue un ajuste bastante bueno a los valores indicados por la aproximación analítica aunque no tanto como el que se obtuvo para la lente *einzel*. La Tabla 2.3 muestra los coeficientes calculados para ambos modelos. Ello es debido a que los valores del potencial axial y sobre todo las

derivadas sucesivas difieren más entre sí que en el caso anterior, al haber introducido electrodos de apantallamiento.

	R_{11}	$R_{12} (m)$	$R_{21} (m^{-1})$	R_{22}
Aprox. Dymnikov	0.0242	5.8×10^{-10}	16.696	41.382
Síntesis numérica	0.0229	-1.4×10^{-8}	18.162	43.530

Tabla 2.3 *Coeficientes de la matriz de transferencia obtenidos en la aproximación analítica y en la lente equivalente sintetizada con el modelo numérico, para $V_3 = -141.82\text{ kV}$, $r_c = 2.66\text{ cm}$. Datos para enfoque de electrones.*

Tomando un valor de la emitancia $em = 10^{-8}m$, los parámetros de modelado del haz que suministra la aproximación de Dymnikov son $r_1 = 106.8\text{ }\mu m$, $l_{12} = 1.12m$. En la Figura 2.14 (a) se representa un *spot* de 1500 trayectorias en el plano del blanco, computado para la geometría y polarizaciones establecidas. Notemos que al tratarse de un rango de energías en el que los electrones ya presentan un comportamiento relativista, las ecuaciones que se deben integrar son las dadas en (1.30), con $W_0 = 0.5110034\text{ MeV}$ y $\phi_i = 5\text{ kV}$. Observamos que el *spot* corresponde exactamente a la imagen gaussiana, es decir, carece de halo. De acuerdo con el criterio de *spot* de tamaño mínimo, lo que sugiere este resultado es que debemos continuar en el modelo numérico el proceso de optimización hasta conseguirlo. Puesto que –según se ilustra en la Figura 2.11– el parámetro que más influye es el tamaño del objeto, hemos probado a disminuir el valor de r_1 . Las Figuras 2.14 (b) y (c) muestran dos etapas sucesivas. El valor de ρ_{av} se va reduciendo hasta que alcanza un mínimo en la (c); una disminución

posterior del valor r_1 nos da un radio promedio mayor y por tanto elegimos el (c) como diseño óptimo.

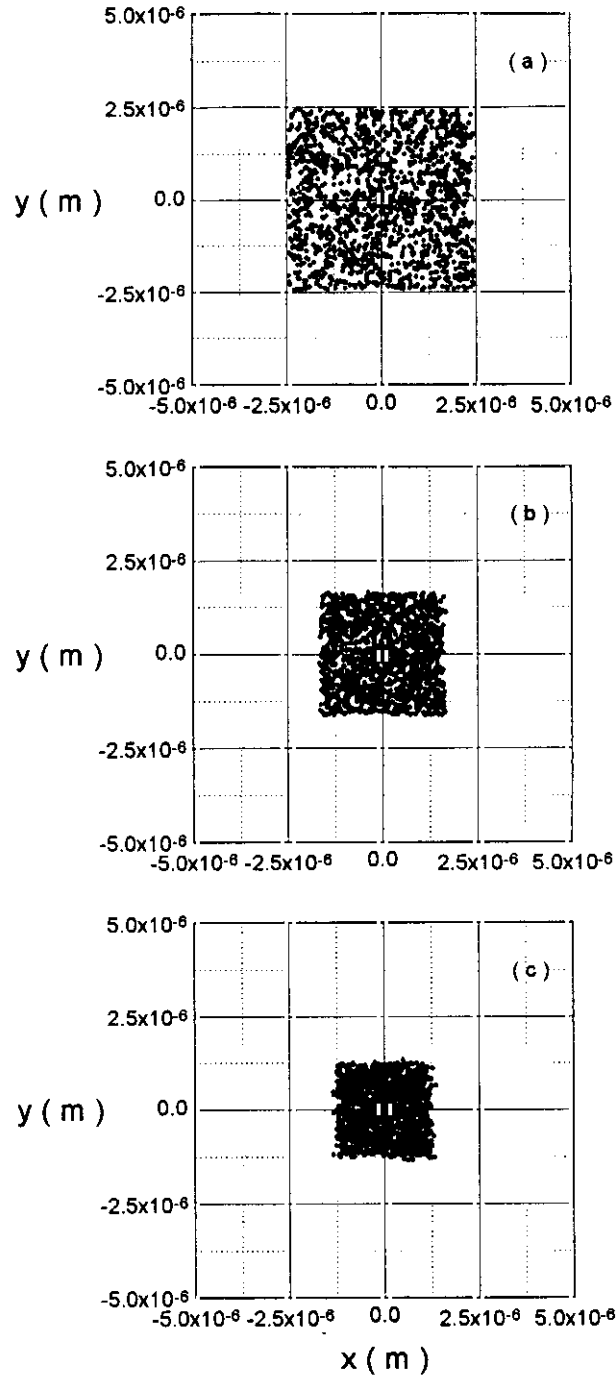


Figura 2.14 Spots obtenidos en la lente aceleradora para $em = 10^{-8} m$, $l_{12op} = 1.12 m$. (a) $r_1 = 106.8 \mu m$, $\rho_{av} = 1.86 \mu m$; (b) $r_1 = 71.2 \mu m$, $\rho_{av} = 1.23 \mu m$; (c) $r_{1op} = 53.4 \mu m$, $\rho_{av} = 0.92 \mu m$.

El sistema se puede adaptar con ligeras modificaciones al enfoque y aceleración de protones. Debido a que los protones no son relativistas a estas energías, no basta con cambiar los signos de las polarizaciones sino que el valor de V_3 tiene que ser ligeramente reajustado para conseguir la condición estigmática. Así, manteniendo la misma geometría, el nuevo potencial V_3 ha resultado ser 141.45 kV , suponiendo que la fuente de protones se polariza a 155 kV respecto al blanco.

	R_{11}	$R_{12}\text{ (m)}$	$R_{21}\text{ (m}^{-1}\text{)}$	R_{22}
Aprox. Dymnikov	0.0232	6.5×10^{-10}	17.348	43.057
Síntesis numérica	0.0230	1.1×10^{-8}	17.947	43.101

Tabla 2.4 *Coefficientes de la matriz de transferencia obtenidos en la aproximación analítica y en la lente equivalente sintetizada con el modelo numérico, para $V_3 = 141.45\text{ kV}$, $r_c = 2.66\text{ cm}$. Datos para enfoque de protones.*

En la Tabla 2.4 se dan los coeficientes de la matriz de transferencia para este caso. El modelo de Dymnikov obtiene $r_1 = 107.7\text{ }\mu\text{m}$, $l_{12} = 1.13\text{ m}$, pero nosotros hemos encontrado que es posible en el sistema real disminuir algo más el valor de r_1 para obtener el *spot* de tamaño mínimo. En la Figura 2.15 se representa el *spot* óptimo calculado con $r_{1op} = 48.0\text{ }\mu\text{m}$, $l_{12op} = 1.13\text{ m}$.

En resumen, a lo largo de esta sección hemos mostrado las posibilidades que ofrece la combinación adecuada de los modelos utilizados en el diseño. Aun en el caso de que no se pueda establecer una equivalencia total entre los parámetros que suministra la aproximación analítica y los del modelo numérico, los primeros se pueden utilizar como guía de forma que nos lleven finalmente a un diseño optimizado que se ajusta bastante bien a las condiciones de trabajo especificadas.

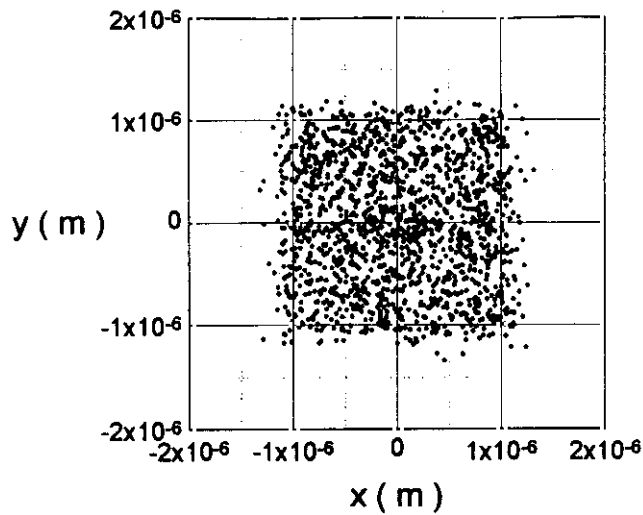


Figura 2.15 *Spot óptimo para la lente aceleradora de protones. $em = 10^{-8} m$, $r_{1op} = 48 \mu m$, $l_{12op} = 1.13 m$, $\rho_{av} = 0.838 \mu m$.*

Se deja abierto un campo de investigación y desarrollo de sistemas que, con un coste relativamente bajo, tienen una aplicación potencial en multitud de experimentos que precisan de haces de partículas cargadas con las características mencionadas. Actualmente estamos analizando lentes aceleradoras multicilindro que pueden llegar hasta los $2 MeV$.

2.6 Bibliografía

- [1] H. Buch, *Berechnung der Bahn von Kathodenstrahlen im axialsymmetrischen elektromagnetischen Felde*, Ann. Phys. **81**, 974-993, (1926).
- [2] P. W. Hawkes y E. Kasper, *Principles of Electron Optics*, Academic Press, Caps. 35-40, (1989).
- [3] W. Scharf, *Particle accelerators and their uses*, Harwood Academic Publ., (1986).
- [4] C. J. Davidsson y C. J. Calbick, *Electron lenses*, Phys. Rev. **42**, 580-583, (1932).

- [5] E. Brüche y H. Johannson, *Elektronenoptik und Elektronenmikroskop*, Naturwissenschaften **20**, 353-358, (1932).
- [6] W. Glaser, *Grundlagen der Elektronenoptik*, Springer, (1952); *Handbook der Physik* **33**, Springer, 188-254, (1956).
- [7] G. Möllenstedt, *100 keV elektronen im elektrostatischen Elektronenmikroskop*, Optik **12**, 441-466, (1955).
- [8] H. Mahl, H. Volkmann y W. Weitsch, *Über ein neues elektrostatisches Gebrauchs-Elektronen-mikroskop*, Electron Microsc., 34-37, (1956).
- [9] F. Lenz, *Computer-aided design of electron optical systems*, in: Image Processing and Computer-Aided Design in Electron Optics, Academic Press, 274-282, (1973).
- [10] E. Harting y F. H. Read, *Electrostatic Lenses*, Elsevier, (1976).
- [11] D. W. O. Heddle, *Electrostatic Lens Systems*, Adam Hilger, (1991).
- [12] B. Lencová, *Handbook of Charged Particle Optics*, CRC Press, Cap. 5, 177-221, (1997).
- [13] L. de Broglie, *Optique électronique et corpusculaire*, Hermann, (1950).
- [14] V. E. Cosslett, *Introduction to electron optics*, Oxford University Press, Caps. II y IV, (1950).
- [15] A. Dymnikov y R. Hellborg, *Matrix theory of the motion of a charged particle beam in curvilinear space-time*, Nucl. Instr. and Meth. A **330**, 323-362, (1993).
- [16] A. D. Dymnikov y G. Martínez, *Charged Particle Microprobes with minimum Beam Spot Size for a given Beam Current*, Proceedings of the 14th Int. Conf. on Application of Accelerators in Research and Industry, AIP Press, 731-734, (1997).

- [17] A. D. Dymnikov, G. Martínez y A. H. Azbaid, *The matrizant method for an optimal synthesis of electrostatic multiple cylinder lenses*, Nucl. Instr. and Meth. A **403**, 195-204, (1998).
- [18] P. Grivet, *Electron Optics*, Pergamon Press, Cap. 7, (1972).
- [19] E. Harting y F. H. Read, *Electrostatic Lenses*, Elsevier, Sec. 3, (1976).
- [20] A. Renau y D. W. O. Heddle, *Geometric aberrations in electrostatic lenses: II. Aberration coefficients and their interrelations*, J. Phys. E: Sci. Instrum. **19**, 288-295, (1986).
- [21] G. Martínez y M. Sancho, *Accurate calculation of geometric aberrations in electrostatic lenses*, Nucl. Instr. and Meth. A **363**, 198-204, (1995).
- [22] G. Martínez y M. Sancho, *Application of the integral equation method to the analysis of electrostatic potentials and electron trajectories*, en: Adv. Electron. and Electron Phys. **81**, 1-41, Academic Press, (1991).

Capítulo 3

SÍNTESIS OPTIMIZADA DE LENTES ELECTROSTÁTICAS CUADRUPOLES

3.1 Introducción

Una microsonda es un dispositivo capaz de generar haces de partículas cargadas, acelerarlas hasta energías elevadas (del orden de los MeV), y después enfocarlas para dar imágenes muy pequeñas. La Figura 3.1 muestra un diagrama de bloques del sistema. Durante las dos últimas décadas, la tecnología utilizada en la construcción de las microsondas ha mejorado constantemente, lográndose resoluciones del orden de 100 *nm*. Estos dispositivos ofrecen la posibilidad de analizar en volumen la micro-estructura de sólidos, muestras biológicas, médicas, etc., donde se usan con ventaja frente a otras técnicas como la de rayos X, por ser menos destructiva [1,2]. Por este motivo, su introducción en los laboratorios de investigación aplicada se encuentra en constante auge.

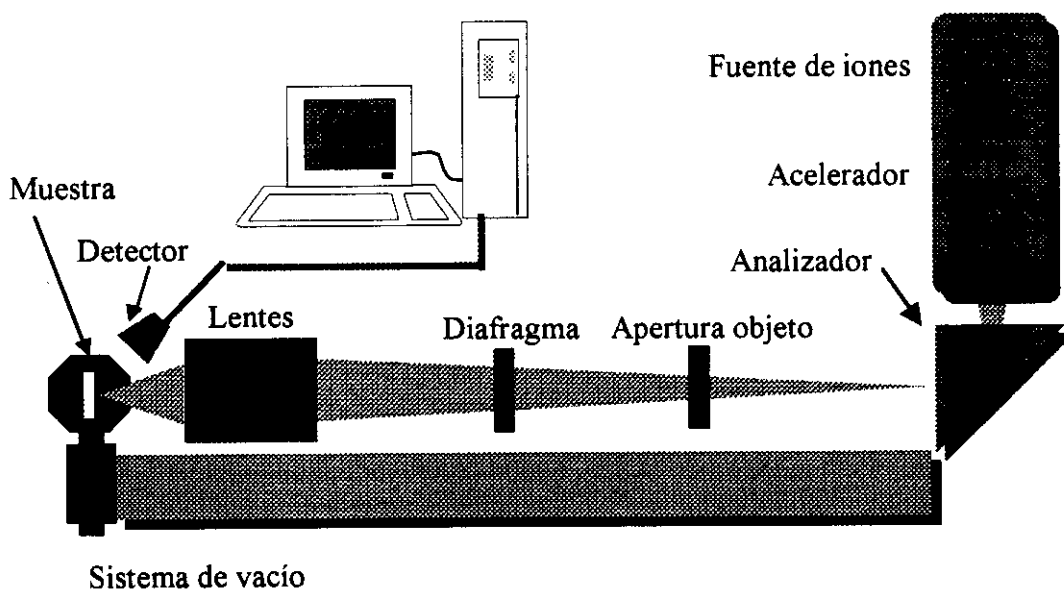


Figura 3.1 *Esquema de una microsonda: un haz de iones de alta energía pasa a través de dos aperturas y de un sistema de lentes para formar una sonda sobre la muestra.*

Una parte esencial de la microsonda la constituye el sistema de enfoque: es preciso diseñarlo de forma que produzca imágenes nítidas, libres de aberración en la mayor medida posible.

Las lentes de simetría rotacional son demasiado débiles para enfocar partículas a estas energías, por ello se recurre a los sistemas cuadrupolares aprovechando su capacidad de proveer un campo transversal suficientemente intenso. Hasta ahora los cuadrupolos más utilizados han sido los de tipo magnético, sin embargo para algunas aplicaciones específicas son preferibles los cuadrupolos electrostáticos. Estos ofrecen algunas ventajas frente a los magnéticos: son susceptibles de ser miniaturizados, en cambio, los sistemas magnéticos requieren un espacio muy grande para poner las bobinas de excitación. La compacidad de la lente libera más espacio para la cámara de la muestra. Las lentes electrostáticas no sufren efectos de histéresis. La corriente consumida es despreciable y una tensión estable para la polarización de los electrodos se logra más fácilmente que una gran corriente estable como la que necesitan los sistemas magnéticos.

Pero quizá la ventaja más destacable es que el campo requerido para enfocar el haz en el blanco es independiente de la masa de la partícula; así, se puede experimentar con iones de distintos tipos sin modificar el punto de trabajo del dispositivo. Una última ventaja es que su mecanización es relativamente simple lo que facilita su producción a escala industrial.

El estudio que se propone en este capítulo pretende profundizar en el conocimiento de las características de enfoque de las lentes formadas por asociaciones de cuatro cuadrupolos electrostáticos (cuadruplete), y determinar la construcción óptima de un cuadruplete electrostático como sistema de enfoque.

La primera parte está dedicada al estudio de la influencia de la geometría en los parámetros que caracterizan el comportamiento de una lente cuadrupolar. En la segunda parte se estudiará un sistema cuádruplete electrostático con vistas a simular una construcción óptima mediante la combinación de dos modelos de cálculo diferentes. Se seguirá un esquema análogo al utilizado para las lentes cilíndricas. El capítulo finaliza con un estudio de las aberraciones cromática y mecánica de dicho sistema.

3.2 Modelo de un sistema cuadrupolar

Llamaremos lente cuadrupolar a un sistema formado por cuatro electrodos cilíndricos situados paralelamente al eje Oz , polarizados alternativamente al potencial $\pm V$, como se muestra en la Figura 1.1, poseyendo cuatro planos de simetría a lo largo del eje Oz . Esta configuración produce un campo eléctrico que para cualquier punto M perteneciente a la zona de primer orden, es proporcional a la distancia entre M y el eje Oz ; así, el gradiente del campo en la dirección radial es constante en dicha zona.

3.2.1 Modelo analítico del potencial y del campo

Para analizar el potencial electrostático, primero se supone que los electrodos son infinitamente largos en la dirección Oz , y el potencial ϕ y el campo dependen solamente de las variables x e y . En ausencia de carga espacial el potencial satisface a la ecuación de Laplace

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (3.1)$$

Para un sistema de tipo cuadrupolar, cuya sección transversal se muestra en la Figura 3.2, debido a las simetrías y antisimetrías la solución de la ecuación (3.1) se

simplifica bastante con respecto a un caso general [3,4]. El potencial se expresa en la forma:

$$\frac{\phi(x,y)}{V} = K_2 \frac{x^2 - y^2}{a^2} + K_6 \frac{(x^6 - 15x^2y^2(x^2 - y^2) - y^6)}{a^6} + \dots \tag{3.2}$$

siendo a la apertura del sistema.

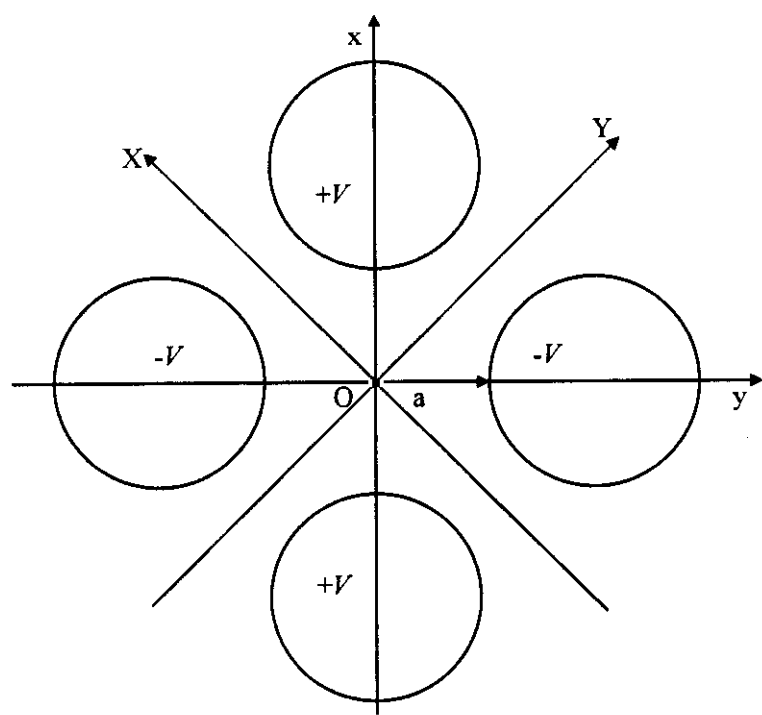


Figura 3.2 *Sección transversal de un sistema cuadrupolar.*

Los coeficientes K_n son constantes que dependen sólo de la forma de los electrodos. Las componentes del campo E_x y E_y vienen dadas por

$$E_x = -\frac{\partial \phi}{\partial x} \qquad \text{y} \qquad E_y = -\frac{\partial \phi}{\partial y} \tag{3.3}$$

Para obtener un campo con un gradiente constante en la dirección radial, los coeficientes K_{2n} con $n > 1$ deben anularse, y entonces

$$\frac{\phi(x,y)}{V} = \frac{K_2}{a^2}(x^2 - y^2) \quad (3.4)$$

Esta función se obtiene haciendo coincidir las superficies de los electrodos con la ecuación ($K_2 = 1$)

$$\frac{x^2 - y^2}{a^2} = 1 \quad (3.5)$$

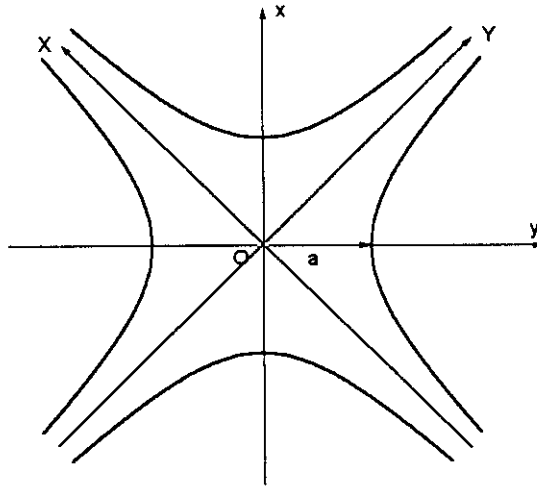


Figura 3.3 *La configuración ideal de un cuadrupolo: una hipérbola equilátera con direcciones asintóticas a OX y OY.*

Por tanto, la configuración ideal sería la de cuatro electrodos cuya sección tuviera la forma de una hipérbola equilátera con direcciones asintóticas a OX y OY como las que se muestran en la Figura 3.3. Debido a las dificultades en la mecanización y alineamiento de este tipo de electrodos, en la práctica se diseñan electrodos de factura mas simple y que dan lugar a distribuciones de potencial bastante similares a las de esta configuración ideal. Si sólo tenemos en cuenta el término fundamental del desarrollo, y denominamos por $\Gamma(0)$ gradiente radial en el centro del cuadrupolo, podemos expresar las componentes del campo en un punto M mediante las relaciones:

$$\begin{aligned} E_x &= -\Gamma(0)r \cos \varphi \\ E_y &= \Gamma(0)r \sin \varphi \end{aligned} \quad (3.6)$$

siendo r y φ las coordenadas cilíndricas de M , y donde el origen de φ se toma sobre Ox . En este eje, $E_x = -\Gamma(0)x$ y E_y es nulo, y sobre el eje Oy , E_x es nulo y $E_y = \Gamma(0)y$. A lo largo de los ejes OX y OY , el campo tiene la dirección de dichos ejes.

La existencia de estos elementos de simetría en los campos nos permite ver la naturaleza relativamente sencilla de ciertas familias de trayectorias: para una carga positiva moviéndose en el plano Oxz , la fuerza efectiva está en la dirección Oz , la trayectoria queda confinada en el plano y converge hacia el eje. En el plano Oyz , la trayectoria también transcurre en el plano pero la fuerza es desenfocante (la partícula se aleja del eje). En otros casos, la fuerza obliga a la partícula a describir un camino de forma helicoidal a lo largo del eje Oz .

3.2.1.1 Efectos de borde

El estudio que hemos hecho deja de ser válido cuando nos acercamos a los extremos del cuadrupolo. Sólo puede aplicarse en la zona central y siempre que la longitud de los electrodos l_c sea mucho mayor que la apertura α . En las proximidades de los bordes, el potencial y los campos serán funciones de las tres variables x, y, z ; esta es la región con efectos de borde. Sin embargo, los planos de simetría son los mismos que antes y el potencial puede ponerse en la forma [4]:

$$\begin{aligned} \frac{\phi(x, y, z)}{V} &= \frac{K_2}{a^2} (x^2 - y^2) \left[f_2(z) - \frac{1}{12} f_2''(z)(x^2 + y^2) + \frac{1}{384} f_2^{(iv)}(z)(x^2 + y^2)^2 \right] + \\ &\quad \frac{K_6}{a^6} f_6(z)(x^2 - y^2)(x^4 - 14x^2y^2 + y^4) + \dots \end{aligned} \quad (3.7)$$

las funciones $f_2(z)$ y $f_6(z)$ están normalizadas y representan la distribución del segundo y sexto armónico del campo a lo largo del eje óptico; en la región central son iguales a la unidad, y por consiguiente la ecuación (3.7) se reduce a la (3.2).

Si consideramos únicamente el término fundamental, la función $f_2(z)$ proporciona para cada plano transversal (z constante) el valor del gradiente transversal respecto al valor unidad del gradiente en el centro. Se conoce como 'función característica' de la lente. El cálculo de esta función característica puede hacerse de manera rigurosa para el caso de electrodos circulares cóncavos [4]. Analicemos brevemente su comportamiento:

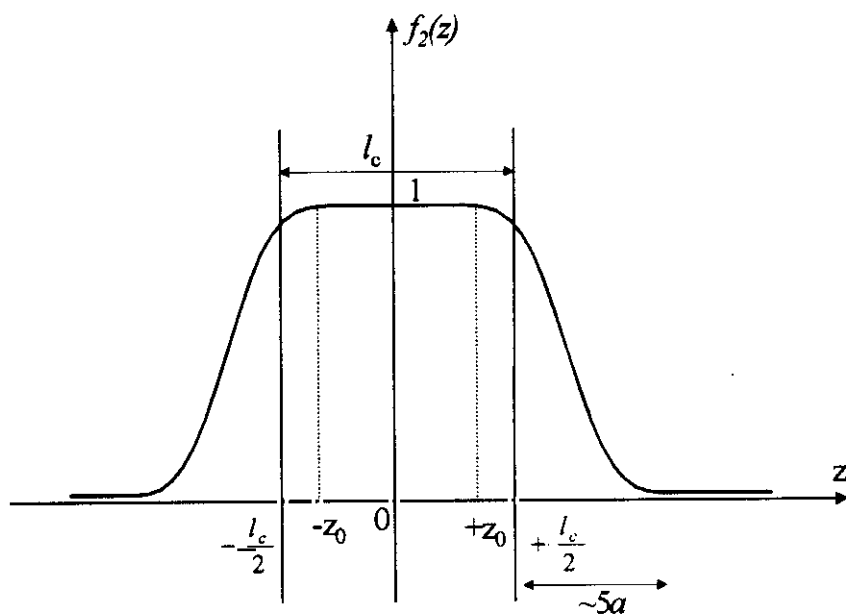


Figura 3.4 Aspecto de la función característica $f_2(z)$ para una lente de longitud l_c y apertura a .

Se demuestra que $f_2(z)$ decrece rápidamente para $|z| > \frac{l_c}{2}$ y tiene aproximadamente la forma que se muestra en la Figura 3.4. Es igual a la unidad en la zona central, de longitud $2z_0 \approx l_c - 2a$. Además

$$f_2(z) = \begin{cases} 1/2 & z = \pm(\frac{l_c}{2} + a) \\ 0 & |z| > (\frac{l_c}{2} + 5a) \end{cases} \quad (3.8)$$

Para otras geometrías, los resultados numéricos dan un comportamiento similar.

3.2.1.2 Valores del gradiente transversal

Por último, para determinar las propiedades ópticas de las lentes en la región de primer orden, supondremos que en ella el potencial viene dado por:

$$\frac{\phi(x, y, z)}{V} \approx \frac{K_2(x^2 - y^2)}{a^2} f_2(z) \quad (3.9)$$

de forma que

$$E_x = -\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{2V K_2 f_2(z)}{a^2} x \quad (3.10)$$

$$E_y = -\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{2V K_2 f_2(z)}{a^2} y \quad (3.11)$$

y el campo varía linealmente con r :

$$E_r = \sqrt{E_x^2 + E_y^2} = \frac{2V K_2 f_2(z)}{a^2} r. \quad (3.12)$$

Si denotamos $\Gamma(0) = \frac{2V K_2}{a^2}$, el gradiente en cada punto será:

$$\Gamma(z) = \Gamma(0) f_2(z) \quad (3.13)$$

3.2.1.3 Longitud equivalente del campo

Como en otros sistemas de óptica corpuscular con campo transversal, la acción de la lente puede caracterizarse mediante la integral

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} E_r dz \quad (3.14)$$

tomada a lo largo de rectas paralelas a Oz , siendo E_r la amplitud del campo radial a la distancia r del eje. Siguiendo estas paralelas, el campo transversal se puede representar mediante una función $E_r(z)$ análoga a $f_2(z)$, tomando únicamente el término fundamental

$$E_r(z) = r \Gamma(0) f_2(z) = E_r(0) f_2(z) \quad (3.15)$$

La función $E_r(z)$ es interesante porque es fácil de evaluar.

Puede definirse una lente teórica, equivalente a la lente real, suponiendo que el campo transversal $E_r(0)$ (valor de E_r en $z = 0$ para la lente real) actúa sólo a lo largo de una longitud L en la dirección axial; la integral A tendría el mismo valor.

Matemáticamente equivale a igualar el área $\int_{-\infty}^{+\infty} E_r(z) dz$ a la de un rectángulo de longitud L y altura $E_r(0)$, es decir,

$$L = \frac{1}{E_r(0)} \int_{-\infty}^{+\infty} E_r(z) dz \quad (3.16)$$

sustituimos la expresión (3.15) en (3.16) y obtenemos una integral simplificada de la longitud L , que en lo que sigue denominaremos 'longitud efectiva':

$$L = \int_{-\infty}^{+\infty} f_2(z) dz \quad (3.17)$$

Este parámetro juega un papel esencial en la conexión del modelo matricial con la simulación numérica que vamos a efectuar. Sólo a través de él es posible trasladar las ventajas en la optimización del sistema que proporciona dicho modelo a una geometría real. En la sección siguiente veremos con detalle cómo se relaciona con la longitud de

los cilindros y su dependencia con el radio de los mismos.

3.2.2 Determinación numérica de los parámetros de un cuadrupolo

Hemos desarrollado en el primer capítulo una versión del método de elementos de contorno por lo cual estamos en condiciones de abordar el cálculo del potencial y del campo electrostático en cualquier región de interés. Para diseñar un sistema óptimo primero necesitamos investigar la influencia de la geometría en los parámetros ópticos que caracterizan una lente cuadrupolar. El método numérico elegido es muy adecuado para ello debido a su flexibilidad en la simulación de contornos; en lo que sigue, se supone que el plano medio de un cuadrupolo esta situado en la posición $z = 0$.

El coeficiente que representa el comportamiento del potencial en la región donde se ignora los efectos de borde es K_2 . Se ha computado comparando el resultado numérico y analítico del potencial en un punto de la zona paraxial. La dependencia de este coeficiente con el cociente r_c/a se muestra en la Figura 3.5.

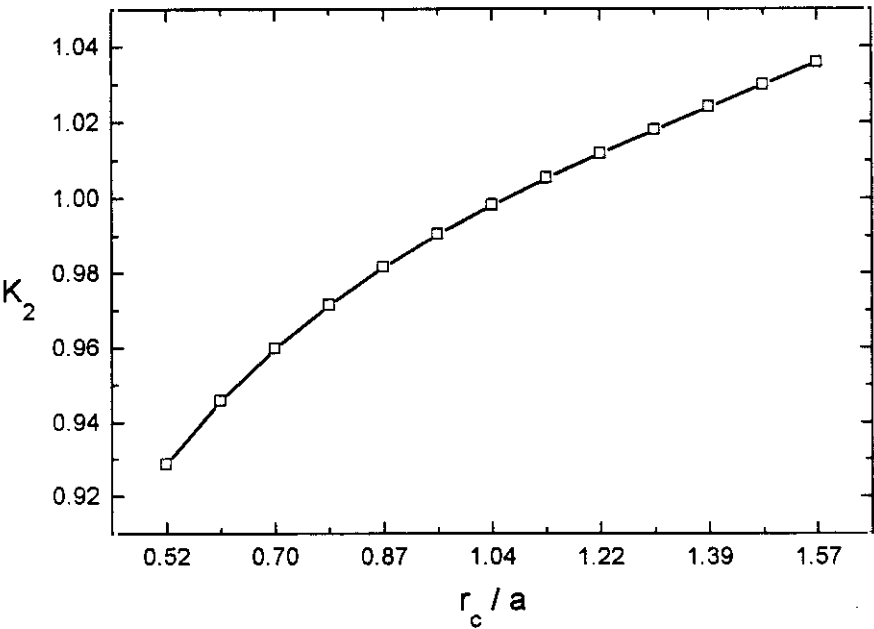


Figura 3.5 Variación de K_2 en función de r_c/a .

Para un valor fijo de la apertura, este coeficiente crece con el radio de los electrodos. De forma análoga, hemos obtenido los valores numéricos de la función normalizada $f_2(z)$ en puntos próximos al eje Oz ; se observa que al acercarse al extremo del cuadrupolo esa función decrece desde la unidad hasta un valor nulo; después, hemos diferenciado numéricamente esa función para conseguir sus derivadas segunda y cuarta, utilizando fórmulas de segundas diferencias centrales [5]. En la Figura 3.6 se muestra su comportamiento en el borde del cuadrupolo; para diferentes valores del cociente r_c/a se observa una leve variación de esas funciones.

Al analizar la acción de la lente, un parámetro de interés para este estudio es la longitud efectiva L dada por la ecuación (3.17). El valor de la apertura y la longitud de los electrodos son las conexiones entre el modelo matricial y el numérico; esa conexión se establece mediante la fórmula empírica:

$$L = l_c + \delta a \quad (3.18)$$

para integrar numéricamente la ecuación (3.17) hemos usado la regla de Simpson. La caracterización de este parámetro se ha hecho en dos casos diferentes; en el primero, se supone que l_c es constante y hemos estudiado cómo varía el coeficiente δ en función de los radios de los electrodos r_c para diferentes aperturas. Los resultados están representados en la Figura 3.7; observemos que su valor es siempre menor que uno, al contrario de lo que ocurre en las lentes magnéticas [4]. Notemos que este es el primer estudio que muestra el comportamiento claramente diferente de los cuadrupolos electrostáticos; hasta ahora se ha tomado $\delta \approx 1.1$ —propio de los cuadrupolos magnéticos— llevando a establecer una equivalencia errónea [3].

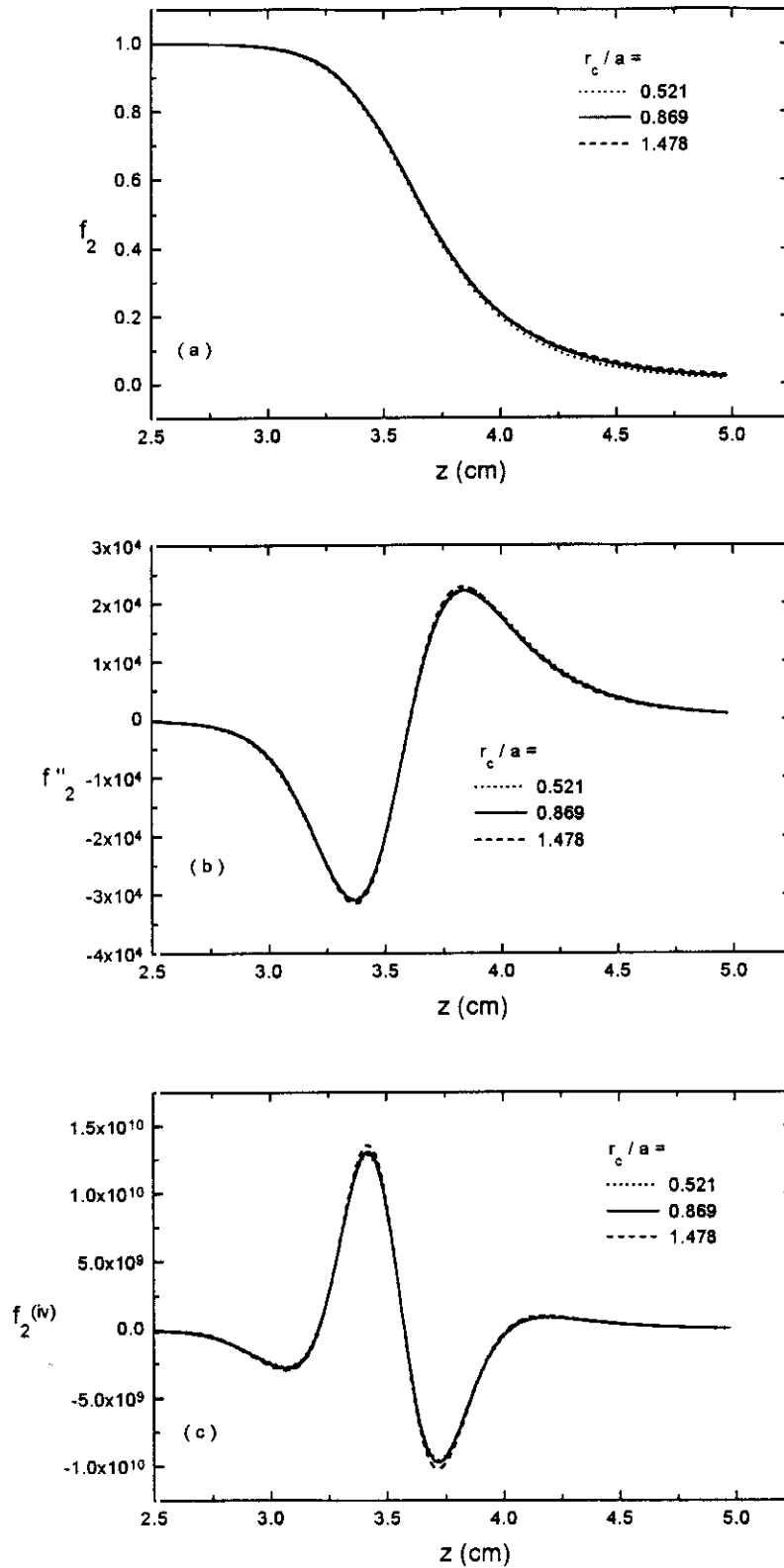


Figura 3.6 Variación de f_2 , f_2'' y $f_2^{(iv)}$, cerca del borde del cuadrupolo, para tres valores de r_c/a ; $l_c = 7$ cm.

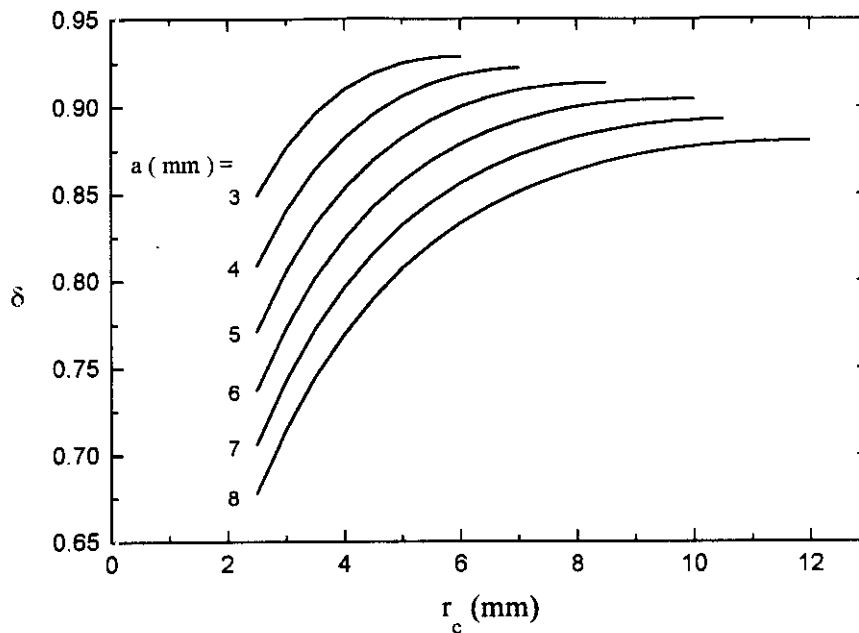


Figura 3.7 El factor δ en función del radio r_c y para diferentes aperturas a .

En el segundo caso se toman los valores que utilizaremos en nuestro estudio, $L = 7.5 \text{ cm}$ y $a = 0.575 \text{ cm}$. En la Tabla 3.1 se muestra los valores computados de δ en función del cociente r_c/a , se observa que los resultados muestran la misma tendencia que la Figura 3.7.

r_c/a	0.521	0.695	0.869	1.043	1.218	1.391
δ	0.819	0.868	0.897	0.916	0.928	0.934

Tabla 3.1 Valores del coeficiente δ para diferentes valores del cociente r_c/a ; la longitud efectiva se fija en $L = 7.5 \text{ cm}$ y la apertura en $a = 0.575 \text{ cm}$.

Finalmente, hemos computado el campo radial en $z = 0 \text{ cm}$ y en el borde del cuadrupolo. Una comparación de los valores numéricos y analíticos en varios puntos en el plano medio y diferentes posiciones radiales en la zona de primer orden, muestran un

acuerdo óptimo entre ellos, dando diferencias relativas menores del 0.03%. En la Figura 3.8 se muestran las variaciones del campo radial en el centro y en el borde del cuadrupolo, para puntos situados en el plano $x = y$, con diferentes valores del cociente

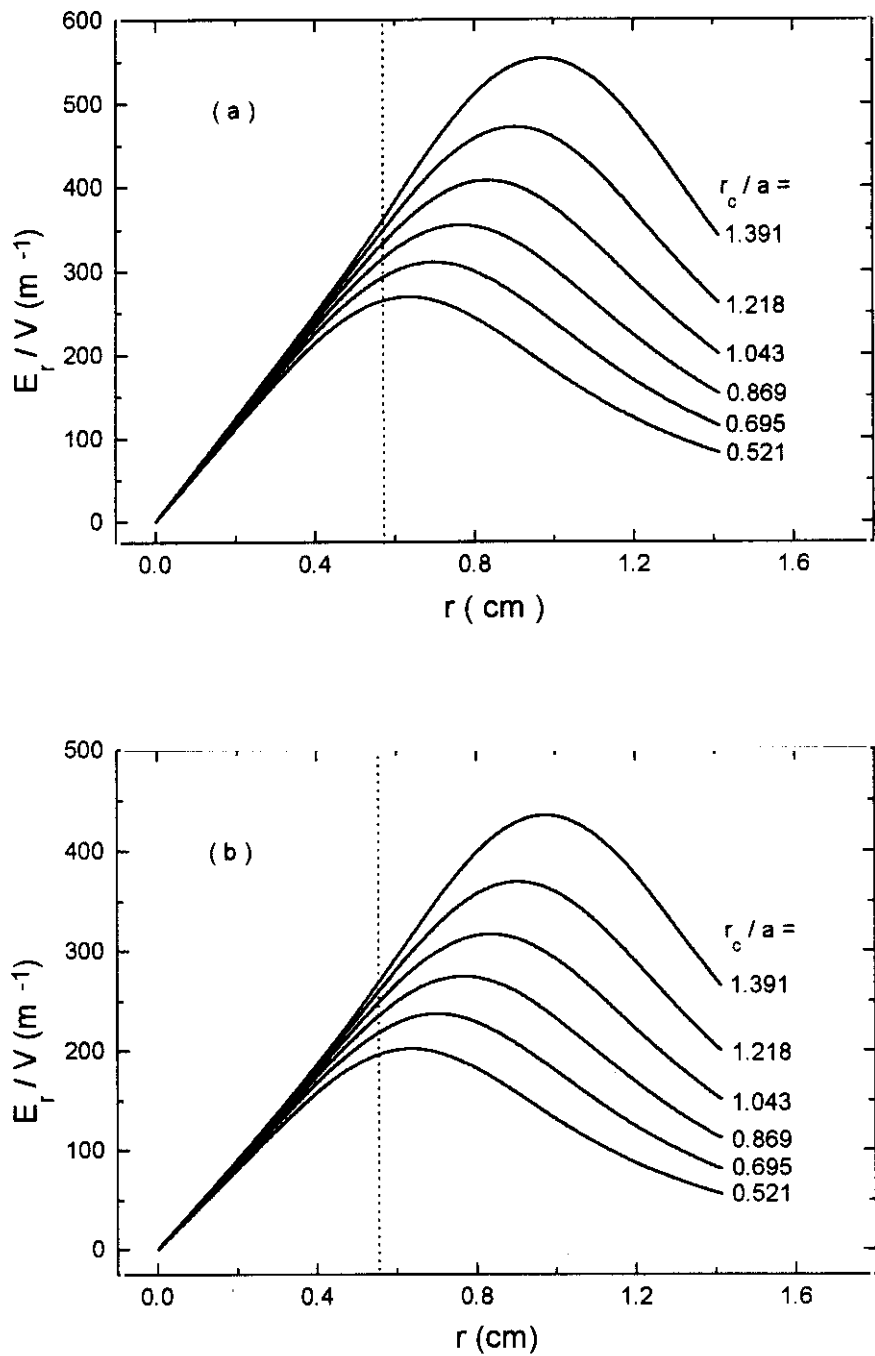


Figura 3.8 Variación del campo radial en el plano $x = y$ para diferentes valores del cociente r_c/a . (a) $z = 0$. (b) $z = l_c/2$. La línea de puntos corresponde al valor $r = a$.

r_c/a . Cerca del eje, el campo es lineal y luego se separa de este comportamiento alcanzando un máximo que depende del valor de este cociente. Para los radios más pequeños se alcanza antes el tramo no lineal. Más adelante veremos qué influencia tiene esto en el comportamiento del sistema en estudio.

3.3 El cuadruplete electrostático

El sistema de enfoque de partículas de alta energía que vamos a caracterizar está formado por cuatro lentes cuadrupolares como la estudiada en la sección anterior. En la práctica se han utilizado diferentes combinaciones a base de cuadrupolos, como los dobletes, tripletes, etc. [6,7,8,9]. El cuadruplete es el sistema que ha atraído mucho más la atención que cualquier otro multiplete por sus especiales características. El más popular es el cuadruplete ruso [10], que debe este nombre al grupo de Leningrado, que dirigido por el profesor A. D. Dymnikov, ha contribuido extensamente al estudio del mismo. El sistema consiste en dos dobletes idénticos consecutivos, en que el orden de las lentes en el segundo doblete es el reverso de las del primero y los campos están girados 90° . Debido a esta disposición de electrodos y polarizaciones, se puede conseguir que el comportamiento del sistema en el plano imagen sea el mismo que el de una lente con simetría rotacional, lo que es una propiedad muy interesante. En esta sección estudiaremos el sistema cuadruplete ruso electrostático que trabaja en el segundo rango de operación en el que la desmagnificación es positiva. En dicho sistema es posible variar la distancia focal y la desmagnificación dentro de un rango amplio, cambiando la distancia entre el segundo y el tercer cuadrupolo. Cuando la separación entre los mismos es aproximadamente igual a la distancia entre la apertura objeto y el primer cuadrupolo, la configuración da un máximo para la desmagnificación y se conoce como *cuadruplete ruso separado o de tipo Dymnikov* [11,12].

3.3.1 Descripción del cuadruplete tipo Dymnikov

El sistema cuadruplete que vamos a estudiar consiste en dos dobletes consecutivos; cada cuadrupolo está formado por cuatro barras cilíndricas, con el mismo radio r_c , longitud l_c y apertura a , por lo que también vendrán caracterizados por la misma longitud efectiva L . Como hemos mencionado antes, se trata de un sistema ortomórfico, con la misma desmagnificación en los planos Oxz y Oyz . La geometría del sistema se ilustra en la Figura 3.9.

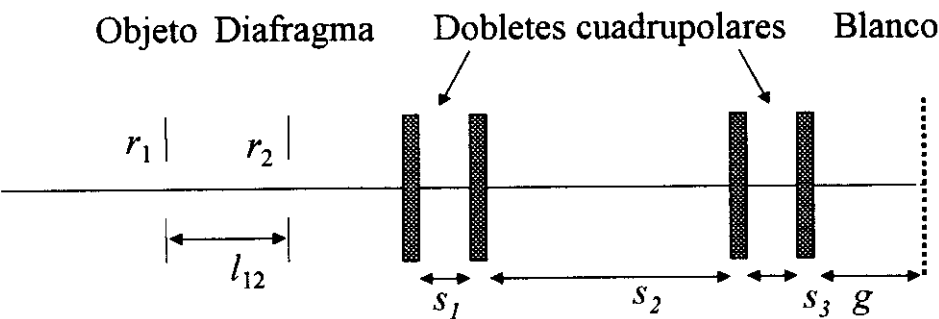


Figura 3.9 Esquema del cuadruplete tipo Dymnikov.

En este diagrama s_i es la separación entre el cuadrupolo i -ésimo y el siguiente y g es la distancia entre el último y el blanco (*working distance*), suponiendo –con vistas a su modelización– que la longitud de los electrodos es L ; la distancia entre la apertura objeto y el blanco se denota por l_t y define la longitud total del sistema,. Asimismo, definimos r_1 , r_2 como los radios de los dos diafragmas puestos antes la entrada del cuadruplete, y l_{12} la separación entre ellos. La emitancia del haz esta definida por $em = r_1 r_2 (l_{12})^{-1}$.

3.3.2 Síntesis optimizada del cuadruplete tipo Dymnikov

Hasta ahora los modelos usados para describir el comportamiento de los campos

eléctricos son sólo aproximaciones analíticas, que si bien tienen validez en la zona cercana al eje del sistema, no pueden dar cuenta de cómo son los campos en otras regiones, y por tanto de qué trayectoria seguirán las partículas en ellas. Nosotros hemos usado dos modelos: el modelo matricial desarrollado por el profesor Dymnikov y el modelo numérico desarrollado en esta tesis. La combinación de estos dos modelos nos permite resolver este problema con un mínimo tiempo de computación y obtener la construcción óptima del sistema. Si la separación entre los cuadrupolos es pequeña, la influencia mutua no puede ignorarse, pero en nuestra configuración los cuadrupolos están lo suficientemente lejos entre si como para que puedan operar independientemente. De esta forma, todos los cálculos realizados para un cuadrupolo se pueden adaptar para el estudio del cuádruplete. Como condiciones del trabajo establecimos los siguientes datos: energía del protón $K = 3 \text{ MeV}$; condición estigmática en los planos Oxz y Oyz , es decir $R_{12x} = R_{12y} = 0$; distancias focales $f_{ix} = f_{iy} = -1.18 \text{ cm}$; desmagnificaciones $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 373$; $a = 0.575 \text{ cm}$, $g = 0.1 \text{ m}$ y $l_1 = 8 \text{ m}$. Para estas condiciones, el modelo de Dymnikov obtiene los valores geométricos: $L = 7.5 \text{ cm}$, $s_1 = s_3 = 0.05 \text{ m}$, $s_2 = 3 \text{ m}$, así como los 'potenciales efectivos' $V_1 = -V_4 = 17.3173 \text{ kV}$, $V_2 = -V_3 = -9.0636 \text{ kV}$. Para un *spot* en el plano objeto consistente en 1000 trayectorias con posiciones y velocidades transversales al eje Oz generadas aleatoriamente, se ha hecho una variación sistemática de los parámetros r_1 y l_{12} hasta encontrar el *spot* imagen con el tamaño mínimo. En la Tabla 3.2 se muestra los resultados de los parámetros óptimos calculados con el modelo de Dymnikov para diferentes emitancias; en la última fila se incluye el valor de la figura de mérito ρ_{0min} en cada caso. Esta cantidad nos servirá de referencia a la hora de estimar el tamaño del *spot* en la simulación numérica.

$em(m)$	10^{-10}	10^{-9}	10^{-8}	10^{-7}
$r_1(\mu m)$	30.7	168	979.8	5503
$l_{12}(m)$	3.75	4.20	4.31	4.38
ρ_{0min}	0.084	0.47	2.8	14.6

Tabla 3.2 *Parámetros óptimos del sistema obtenidos con el modelo de Dymnikov.*

El primer paso a realizar con el modelo numérico es usar los potenciales efectivos obtenidos con el modelo de Dymnikov para encontrar las polarizaciones adecuadas de los electrodos. Este paso hay que repetirlo para cada uno de los diferentes radios r_c . Tomando el potencial efectivo y dividiendo por el valor del coeficiente de forma K_2 obtenemos una estimación inicial del potencial sobre los electrodos. Trazando la trayectoria de una partícula situado en el plano $x = y$, con velocidad inicial paralela al eje Oz , e imponiendo $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 373$, podemos hallar la polarización de los electrodos correspondiente a cada geometría. La diferencia entre la estimación inicial y el valor ajustado finalmente ha sido como máximo del 0.17% lo que muestra la gran concordancia entre ambos modelos y la ventaja que supone partir de los datos suministrados por el modelo matricial, para efectuar la síntesis en cada caso. A modo de ejemplo, en las Figuras 3.10 y 3.11 se ha dibujado la trayectoria de la partícula para un radio de los cilindros $r_c = 0.5\text{ cm}$, a través del cuádruplete proyectada sobre los planos Oxz y Oyz .

Vemos que en dichos planos las trayectorias transcurren por caminos totalmente diferentes, y sólo en la región próxima al blanco empiezan a coincidir, dando exactamente la misma posición en el plano $z = 8\text{ m}$. En las regiones de campo muy débil o nulo las trayectorias son rectilíneas pero sufren desviaciones muy fuertes cuando

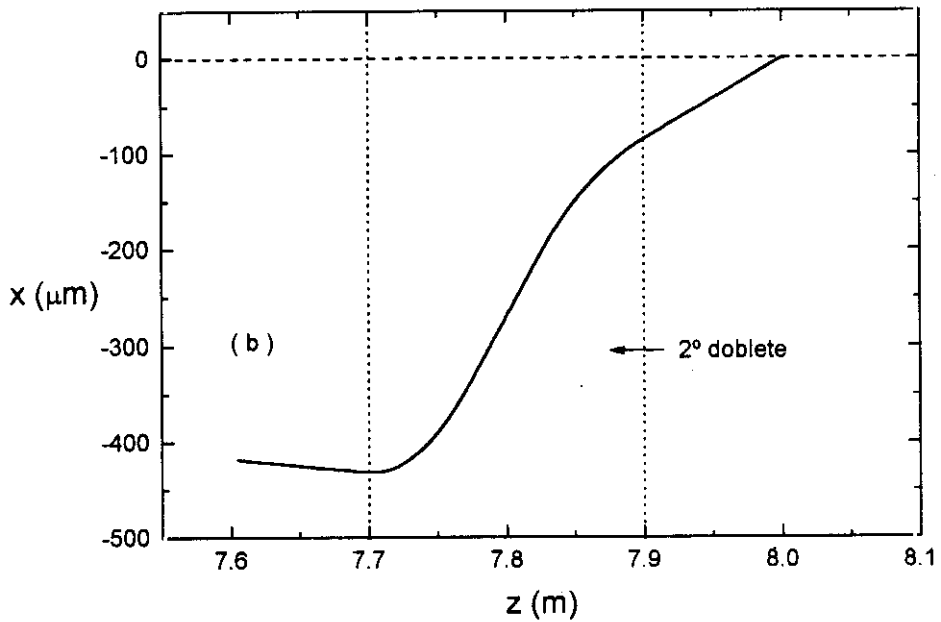
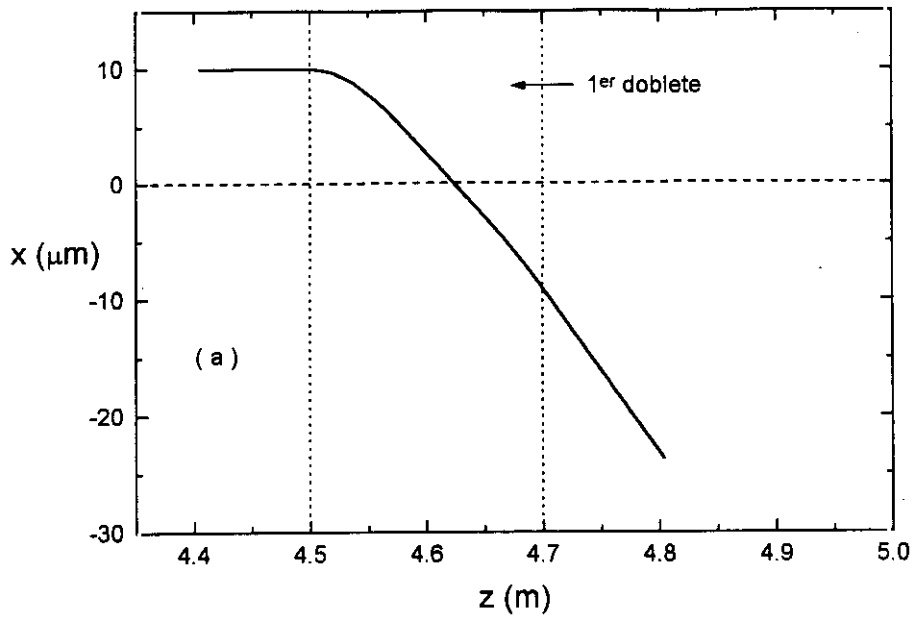


Figura 3.10 Trayectoria de un rayo que llega paralelo al eje Oz proyectada en el plano Oxz. (a) primer doblete, (b) segundo doblete. $V_1 = 17.6397$ kV; $V_2 = -9.2251$ kV.

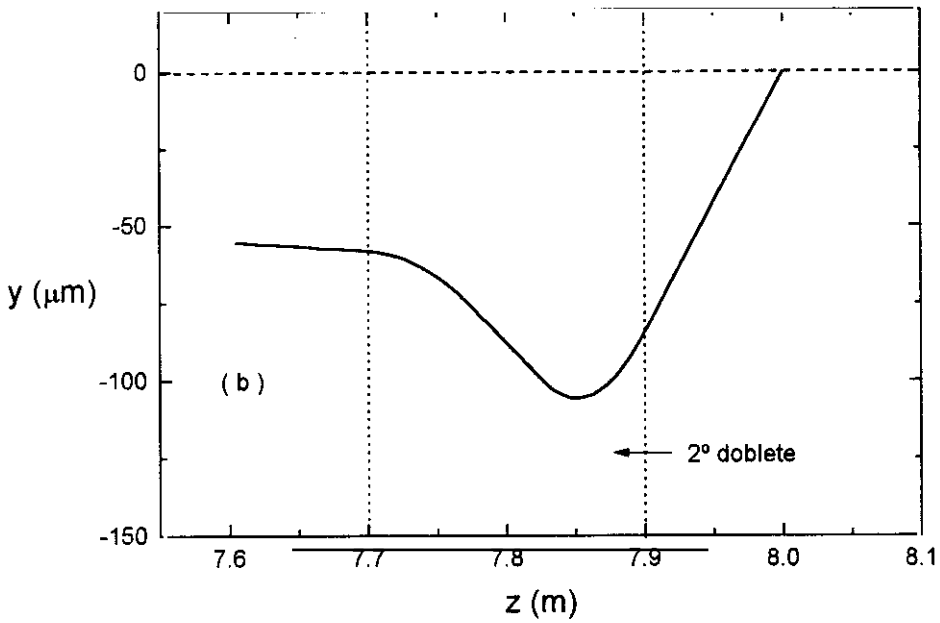
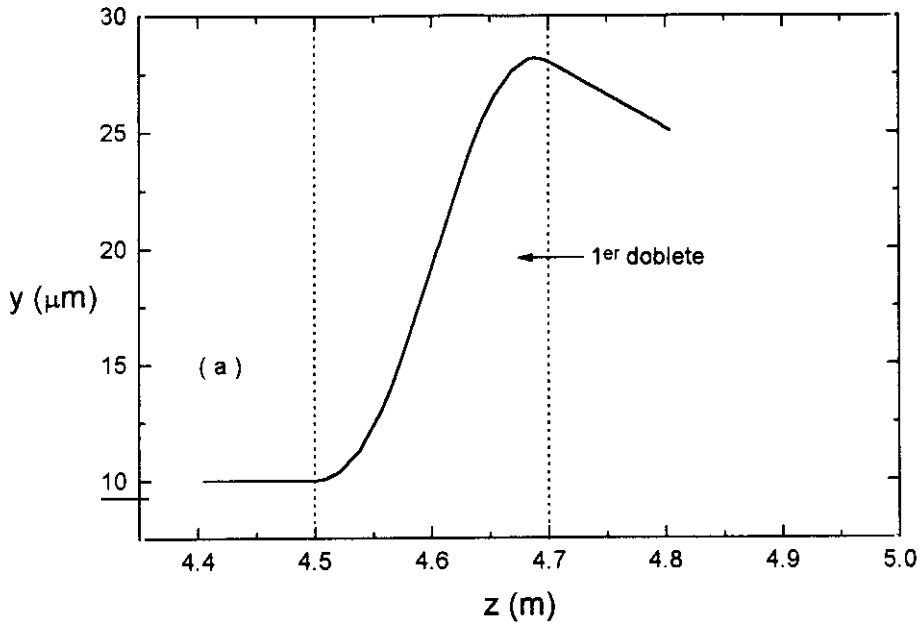


Figura 3.11 Trayectoria de un rayo que llega paralelo al eje Oz proyectada en el plano Oyz . (a) primer doblete, (b) segundo doblete. $V_1 = 17.6397 \text{ kV}$; $V_2 = -9.2251 \text{ kV}$.

la partícula entra en los dobletes y sobre todo cuando empieza a alejarse del eje, ya que el campo radial aumenta rápidamente. Aquí se muestra claramente la capacidad de los sistemas cuadrupolares para enfocar partículas en el rango de altas energías; un sistema de lentes cilíndricas no puede enfocar a estas velocidades, salvo que se establecieran diferencias de potencial prohibitivas.

En la Figura 3.12 se representa la variación del potencial aplicado a los electrodos, en función del cociente r_c/a . Cada pareja V_1 , V_2 se ha ajustado de tal forma que en el plano imagen las desmagnificaciones son $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 373$. Puede parecer ventajoso usar

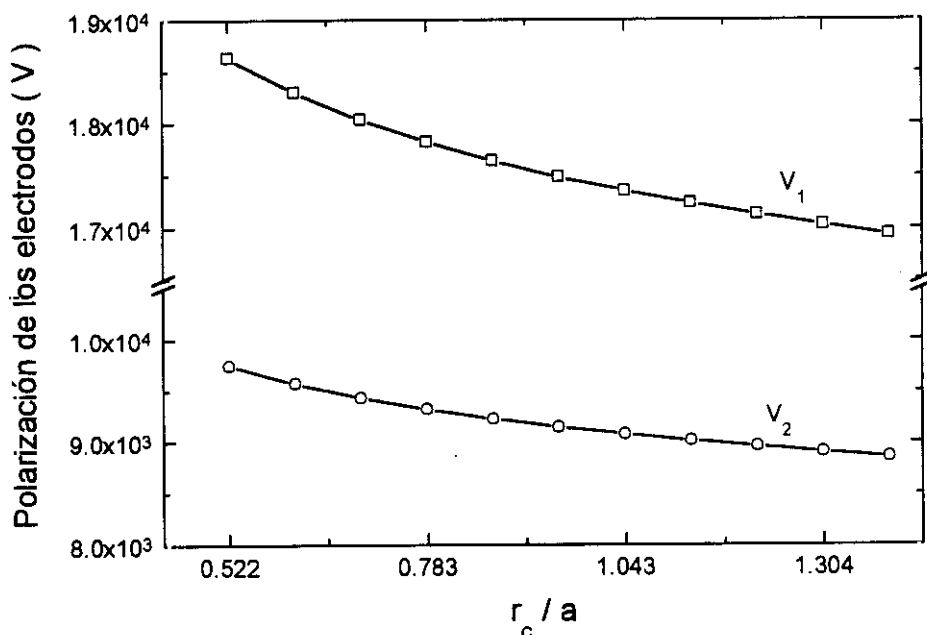


Figura 3.12 Polarización de los electrodos en función del cociente r_c/a .

las geometrías con radios grandes puesto que las polarizaciones son más bajas; sin embargo dicho efecto es ampliamente compensado por el hecho de que esto conlleva un acercamiento de los cilindros, y la posibilidad de que surja una ruptura eléctrica se hace mayor. En la práctica se deben utilizar radios con el menor tamaño posible.

Una vez que se ha determinado las polarizaciones de los electrodos para diferentes radios el paso siguiente es usar los parámetros óptimos obtenidos por el modelo de Dymnikov y aplicarlos al modelo numérico con el objeto de determinar el rango del radio de los cilindros que nos da un *spot* mínimo en el plano imagen. Por ello hemos computado para cada emitancia una serie de *spots* correspondientes a las distintas geometrías, formados por $N = 1000$ trayectorias con posiciones y velocidades transversales iniciales aleatorias, como se hizo en la simulación del capítulo anterior. Dado que las variaciones de velocidad son pequeñas se ha integrado con la fórmula no relativista. El radio promedio de cada *spot* viene dado por:

$$\rho_{av} = \frac{\sum_{j=1}^N (x_{ij}^2 + y_{ij}^2)^{1/2}}{N} \quad (3.19)$$

donde (x_{ij}, y_{ij}) corresponde la coordenada de la trayectoria j -ésima en el blanco.

En la Figura 3.13 se muestra tres *spots* para un valor de la emitancia $em = 10^{-10} m$ y radios $r_c = 0.3, 0.35$ y $0.475 cm$. Se observa que los *spots* corresponden a la imagen Gaussiana con un pequeño halo que se extiende algo más en la dirección del eje Ox ; se puede explicar por el hecho de que la desviación máxima de las trayectorias –que tiene lugar en el segundo doblete– se alcanza para la mayoría de las partículas en el plano Oxz (compárese la Figura 3.10 (b) con la Figura 3.11 (b)). Por tanto será en este plano donde afecte más la aberración esférica. El halo disminuye de un radio a otro y es mínimo para el radio $r_c = 0.475 cm$ que presenta el *spot* óptimo a esa emitancia. Comparándolos con el *spot* del modelo matricial vemos que es este último el que da el mismo comportamiento. Una interpretación similar puede hacerse para otras emitancias más altas. En las Figuras 3.14, 3.15 y 3.16 se representan los *spots* óptimos para las emitancias $em = 10^{-9}, 10^{-8}$ y $10^{-7} m$, respectivamente.

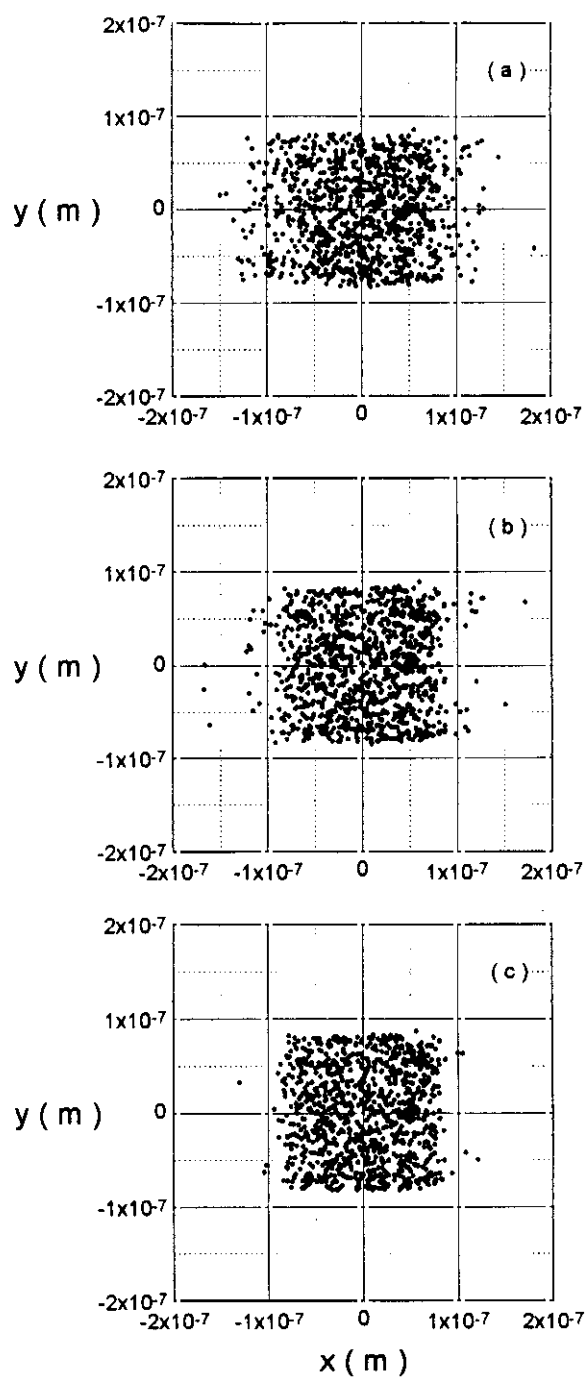


Figura 3.13 Forma de los spots para la emitancia $em = 10^{-10} \text{ m}$; (a) $r_c = 0.3 \text{ cm}$; (b) $r_c = 0.35 \text{ cm}$; (c) $r_c = 0.475 \text{ cm}$.

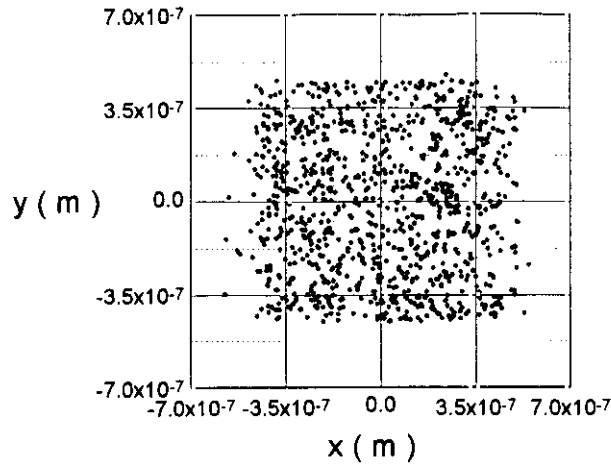


Figura 3.14 *Spot óptimo de la emitancia $em = 10^{-9} m$; $r_c = 0.625 cm$.*

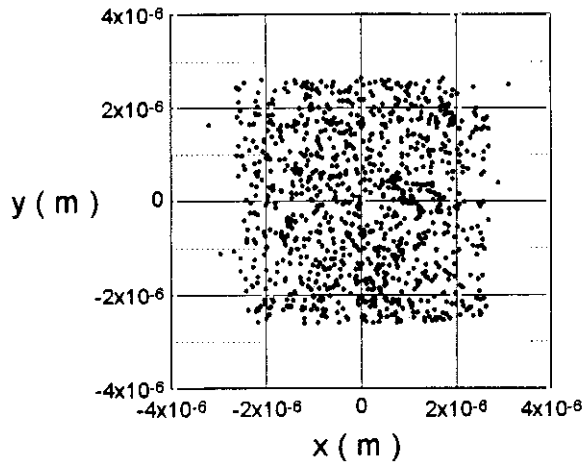


Figura 3.15 *Spot óptimo de la emitancia $em = 10^{-8} m$; $r_c = 0.7 cm$.*

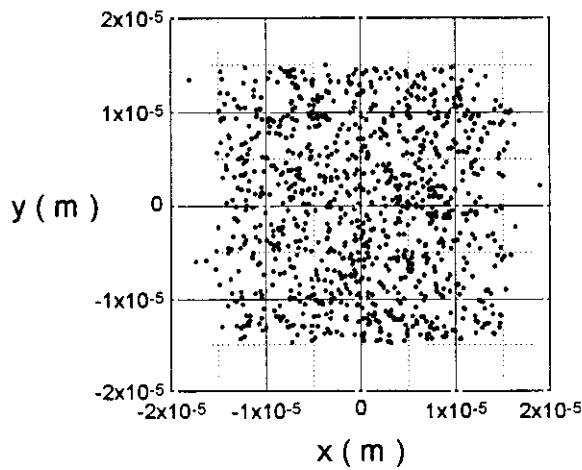


Figura 3.16 *Spot óptimo de la emitancia $em = 10^{-7} m$; $r_c = 0.725 cm$.*

Al igual que los sistemas estudiados en el capítulo anterior, hemos encontrado que la síntesis del modelo matricial no es única. Existe un rango para los radios r_c que proporcionan *spots* similares a los que están definidos como óptimos y que tienen radios promedios aproximadamente iguales. En las Tablas 3.3 (a) – (d) se muestran los valores

(a)

$r_c (cm)$	0.3	0.35	0.4	0.475	0.5	0.6	0.7
$\rho_{av} (\mu m)$	0.066	0.065	0.062	0.062	0.062	0.063	0.065

(b)

$r_c (cm)$	0.5	0.55	0.6	0.625	0.65	0.7	0.75
$\rho_{av} (\mu m)$	0.382	0.369	0.351	0.350	0.350	0.358	0.360

(c)

$r_c (cm)$	0.6	0.65	0.675	0.7	0.725	0.75	0.775
$\rho_{av} (\mu m)$	2.52	2.19	2.08	1.91	1.96	1.99	2.00

(d)

$r_c (cm)$	0.6	0.65	0.675	0.7	0.725	0.75	0.775
$\rho_{av} (\mu m)$	17.40	13.88	12.46	11.37	10.95	11.45	12.26

Tabla 3.3 Valores obtenidos del radio promedio de un spot con $N = 1000$ trayectorias para diferentes valores del radio de los electrodos. (a) $em = 10^{-10} m$; (b) $em = 10^{-9} m$; (c) $em = 10^{-8} m$; (d) $em = 10^{-7} m$.

del radio promedio de los *spots* para cada emitancia estudiada; se observa que el intervalo para la emitancia $em = 10^{-10} m$ se sitúa entre $0.4 cm$ y $0.65 cm$, mientras para la emitancia $em = 10^{-7} m$ está entre $0.7 cm$ y $0.75 cm$. Notemos que el rango de las geometrías apropiadas para la síntesis disminuye al aumentar la emitancia y el r_c óptimo tiende hacia valores más altos.

Pensamos que este comportamiento se puede justificar esencialmente a partir de los campos radiales mostrados en la Figura 3.8. En las regiones próximas al eje, por donde transcurren las trayectorias para emitancias bajas, prácticamente todas las geometrías proporcionan unos campos dados por las ecuaciones (3.10) – (3.12). A medida que nos separamos del eje, las geometrías con cilindros más delgados se alejan antes de dicho comportamiento, probablemente debido a que son geometrías más abiertas y se ven más afectadas por la penetración del potencial de tierra. En conclusión, dependiendo la emitancia se deberá escoger la geometría con el radio más pequeño posible dentro de los que dan un *spot* óptimo con el fin de minimizar el riesgo de ruptura eléctrica y asegurar un buen comportamiento desde el punto de vista de las aberraciones geométricas.

$em(m)$	10^{-10}	10^{-9}	10^{-8}	10^{-7}
$x(m)$	8.4×10^{-4}	1.5×10^{-3}	2.8×10^{-3}	4.5×10^{-3}
$y(m)$	7.0×10^{-6}	1.6×10^{-5}	1.6×10^{-5}	5.1×10^{-5}

Tabla 3.4 *Posición de la trayectoria con máxima desviación para las cuatro emitancias. En todas ellas la coordenada axial es $z = 7.703 m$. Es de notar que para la emitancia más alta la envolvente del haz se encuentra, aproximadamente, a $1.3 mm$ de uno de los electrodos.*

Destacar por último la gran ventaja que supone la combinación de los dos modelos descritos para estos sistemas de enfoque en los que a emitancias tan elevadas

como $10^{-7} m$ siguen obteniéndose imágenes con un halo mínimo. La Tabla 3.4 muestra la desviación máxima del haz con respecto al eje, es decir el valor máximo de $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, para cada una de las emitancias estudiadas. Esta desviación máxima tiene lugar en el segundo doblete y vemos que alcanza valores que distan muy poco de los electrodos para las emitancias más altas. Una elección arbitraria del tamaño y posición de las aperturas a la entrada no permitiría esta calidad en la imagen.

3.4 Análisis de la influencia de la dispersión en energía del haz

Hasta ahora hemos considerado únicamente en la formación de imágenes el efecto de las aberraciones geométricas. En la práctica, existen muchas más causas que pueden afectar a la calidad de la imagen obtenida. Fluctuaciones en los potenciales de aceleración, extracción de partículas de regiones no equipotenciales, etc., van a provocar una dispersión en energía del haz dando lugar a un efecto que se conoce como aberración cromática. Este efecto se traduce en que las velocidades iniciales de las partículas van a estar distribuidas en un cierto rango en torno a un valor de referencia. Por tanto van a presentar un comportamiento diferente bajo la acción de los campos y ello limitará la resolución de la sonda [3,8,13].

En el presente trabajo hemos investigado este fenómeno simulando la dispersión mediante una función Gaussiana de la forma:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} e^{-(x-\mu_x)^2 / 2\sigma_x^2} \quad (3.20)$$

centrada en $\mu_x = K = 3 \text{ MeV}$ y con una desviación estándar $\sigma_x = 2.1$. Esta función representa con bastante fidelidad el comportamiento de un haz de partículas procedente de un acelerador a dichas energías. Además se impone un valor máximo de la dispersión

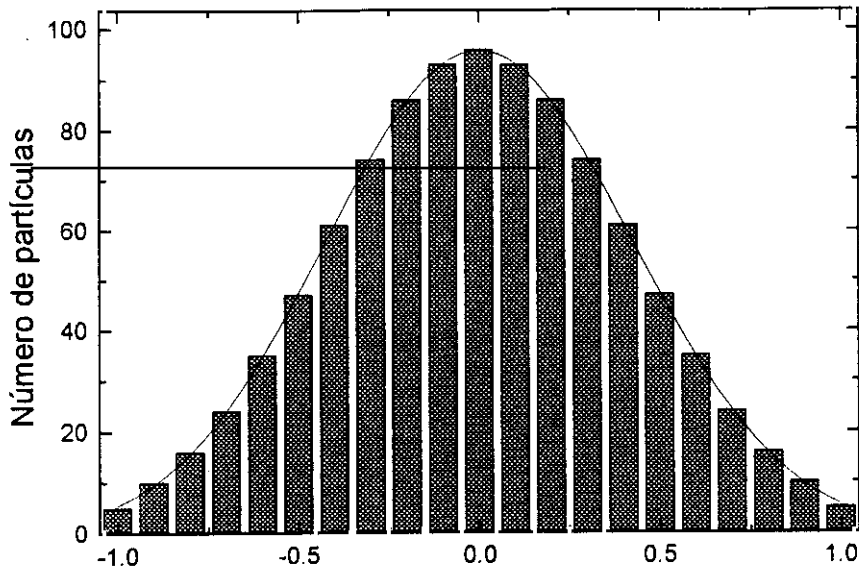


Figura 3.17 *Distribución de las partículas en el intervalo $\pm \Delta K$.*

en energía $\pm \Delta K$ que será variable para poder representar distintas situaciones experimentales. La Figura 3.17 muestra cómo se distribuyen las partículas en cada uno de los diez sub-intervalos en los que se ha dividido el rango total según la ecuación (3.20). Así, las 96 primeras trayectorias se lanzan con la velocidad axial correspondiente

a 3 MeV; las 93×2 siguientes con velocidades correspondientes a $\left(3 \pm \frac{\Delta K}{10}\right)$ MeV; etc.

Con todo ello se puede fijar las velocidades iniciales de las partículas del haz en la dirección axial. Hemos elegido para cada emitancia la geometría y las polarizaciones del *spot* óptimo y hemos computado *spots* de 1000 trayectorias en el plano imagen con

diferentes valores del parámetro $\pm \frac{\Delta K}{K}$; esas variaciones son específicas para cada

emitancia. En las Tablas 3.5 (a) – (d) se dan los valores del radio promedio de *spots* de 1000 trayectorias en función de la dispersión en energía del haz para las distintas emitancias. Vemos que en todos los casos hay un rango ΔK en el que prácticamente no se ve afectada la imagen, lo que establece un margen de tolerancias para esta aberración.

(a)

$\pm \frac{\Delta K}{K} \times 10^5$	2.5	5	7.5	10	12.5	15	17.5
$\rho_{av}(\mu m)$	0.063	0.064	0.066	0.068	0.072	0.075	0.079

(b)

$\pm \frac{\Delta K}{K} \times 10^4$	2	2.5	3	3.5	4	4.5	5
$\rho_{av}(\mu m)$	0.369	0.377	0.386	0.396	0.408	0.420	0.433

(c)

$\pm \frac{\Delta K}{K} \times 10^4$	7	8	9	10	11	12	13
$\rho_{av}(\mu m)$	1.996	2.028	2.064	2.102	2.142	2.190	2.234

(d)

$\pm \frac{\Delta K}{K} \times 10^3$	2.4	2.6	2.8	3	3.2	3.4	3.6
$\rho_{av}(\mu m)$	11.697	11.819	11.934	12.073	12.22	12.372	12.504

Tabla 3.5 Radio promedio de spots obtenidos con $N = 1000$ trayectorias para una variación $\pm \frac{\Delta K}{K}$ con respecto a los casos representados en las Figuras 3.13 (c) y 3.14 – 3.16. (a) $em = 10^{-10} m$; (b) $em = 10^{-9} m$; (c) $em = 10^{-8} m$; (d) $em = 10^{-7} m$.

La simulación indica que la distorsión principal tiene lugar en la dirección Ox ; ello es debido, como ya se dijo anteriormente, a que en esa configuración las mayores desviaciones tienen lugar en el plano Oxz . En la Figura 3.18 se muestran los *spots* que producen un 10% de incremento en el radio promedio para cada caso.

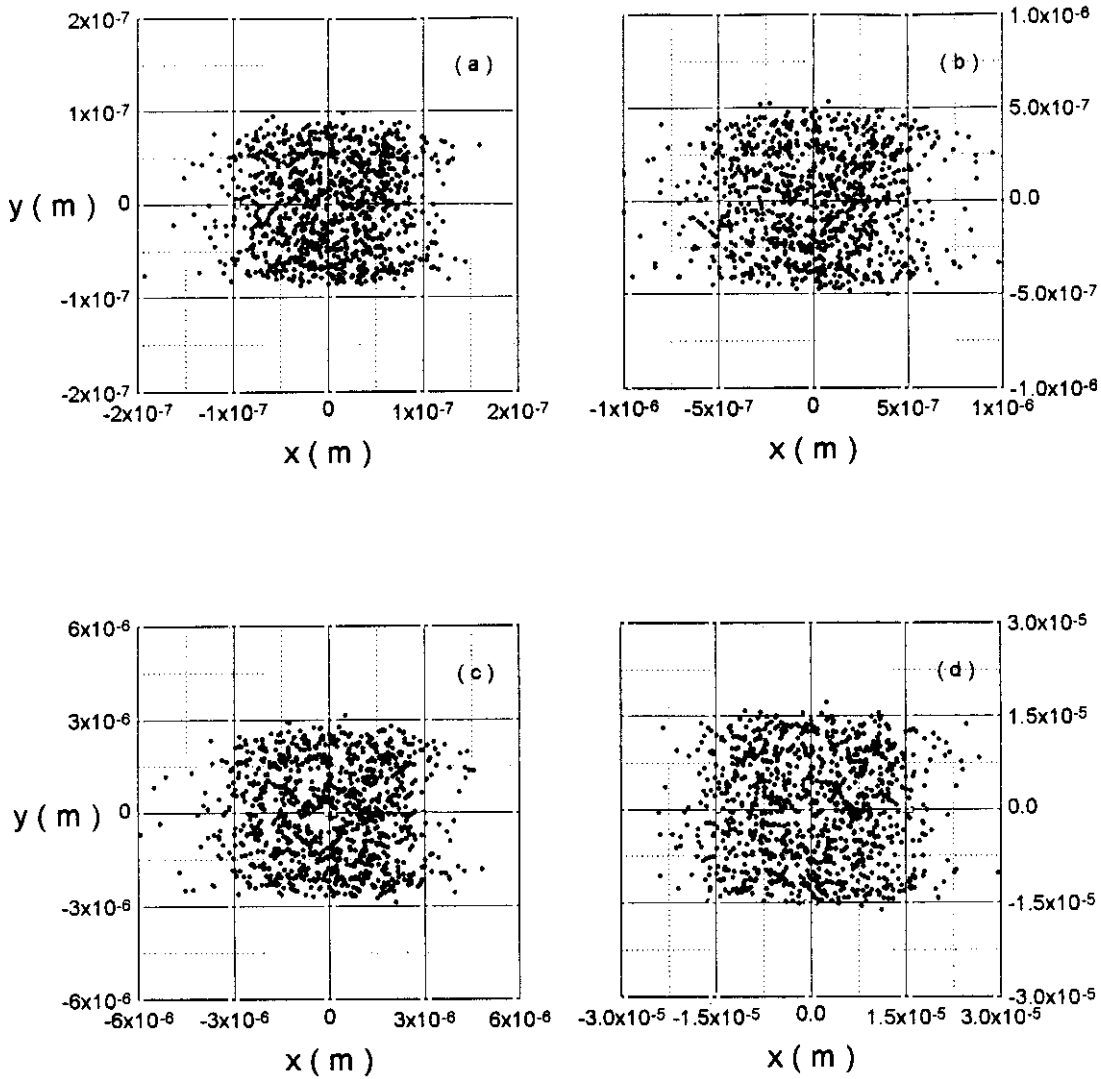


Figura 3.18 Spots mostrando un incremento del 10% en el radio promedio con respecto a los spots óptimos, debido al efecto de aberración cromática.

(a) $em = 10^{-10} \text{ m}$, $\frac{\Delta K}{K} = 10^{-4}$; (b) $em = 10^{-9} \text{ m}$, $\frac{\Delta K}{K} = 3.5 \times 10^{-4}$; (c) $em = 10^{-8} \text{ m}$, $\frac{\Delta K}{K} = 10^{-3}$; (d) $em = 10^{-7} \text{ m}$, $\frac{\Delta K}{K} = 3 \times 10^{-3}$.

Comentaremos por último que se están haciendo grandes progresos en el diseño de fuentes de iones con baja dispersión en energía por lo que es de esperar que esta limitación sea de poca importancia en el futuro [14]. Por otra parte, los aceleradores tipo Tandatron proporcionan actualmente haces estables en el rango $\Delta K / K \approx 10^{-4}$ [15].

3.5 Análisis de la influencia de los defectos mecánicos

En los estudios anteriores hemos considerado que los electrodos son ideales en el sentido que están perfectamente contruidos y montados. Sin embargo, en la práctica se elaboran con herramientas que, aunque son bastante precisas, pueden provocar defectos y perturbaciones que deterioran la calidad de la imagen. Existen varios tipos de aberraciones mecánicas: algunas son debidas a defectos en la mecanización de los electrodos, de manera que no son exactamente circulares y su longitud diferirá en general de la especificada; otras son producidas por un posible desplazamiento de los electrodos o la inclinación de los mismos respecto al eje, etc. Estas aberraciones han sido objeto de un amplio estudio tanto para los sistema ópticos en general como para los cuadrupolares en particular [3,8,16,17,18]. En este tipo de análisis se concluye que son las aberraciones que más pueden limitar el funcionamiento de las lentes.

En el presente trabajo hemos verificado la gran sensibilidad de las lentes cuadrupolares a los defectos mecánicos. Siguiendo el esquema general de este trabajo, no se han caracterizado los distintos coeficientes, sino que nos hemos limitado a analizar el efecto sobre los *spots* óptimos obtenidos en la sección 3.3 en el caso de errores en las longitudes de los cilindros. Dada la flexibilidad que el método numérico utilizado proporciona a la hora de generar geometrías, cualquier otro tipo de defecto podría estudiarse siguiendo un proceso de cálculo análogo. Para estimar la tolerancia del sistema hemos simulado una variación aleatoria de la longitud de los 16 electrodos que forman el cuádruplete. Con esto se pierden las simetrías lo que implica un mayor tiempo de computación debido a que hay que resolver un sistema de 1456 ecuaciones algebraicas para calcular las densidades de carga sobre los electrodos; además hay que hacerlo para cada cuádrupolo por separado. Se han efectuado también los cálculos en cuádruple precisión, comprobando que el error de redondeo no afecta significativamente

los valores de las densidades de carga. A continuación hemos computado varios *spots* con una variación de longitudes de los electrodos $\pm \Delta l_e$ respecto al caso ideal para cada emitancia. Estas $\pm \Delta l_e$ son generados aleatoriamente entre cero y un valor máximo $\pm \Delta l_{cm}$. Los resultados muestran que, en general, se produce una distorsión de la imagen análoga a la de aberración cromática y además un desplazamiento del *spot* en su conjunto. Es de notar que dicho desplazamiento es extremadamente variable. La Figura 3.19 ilustra este comportamiento para $em = 10^{-7} m$.

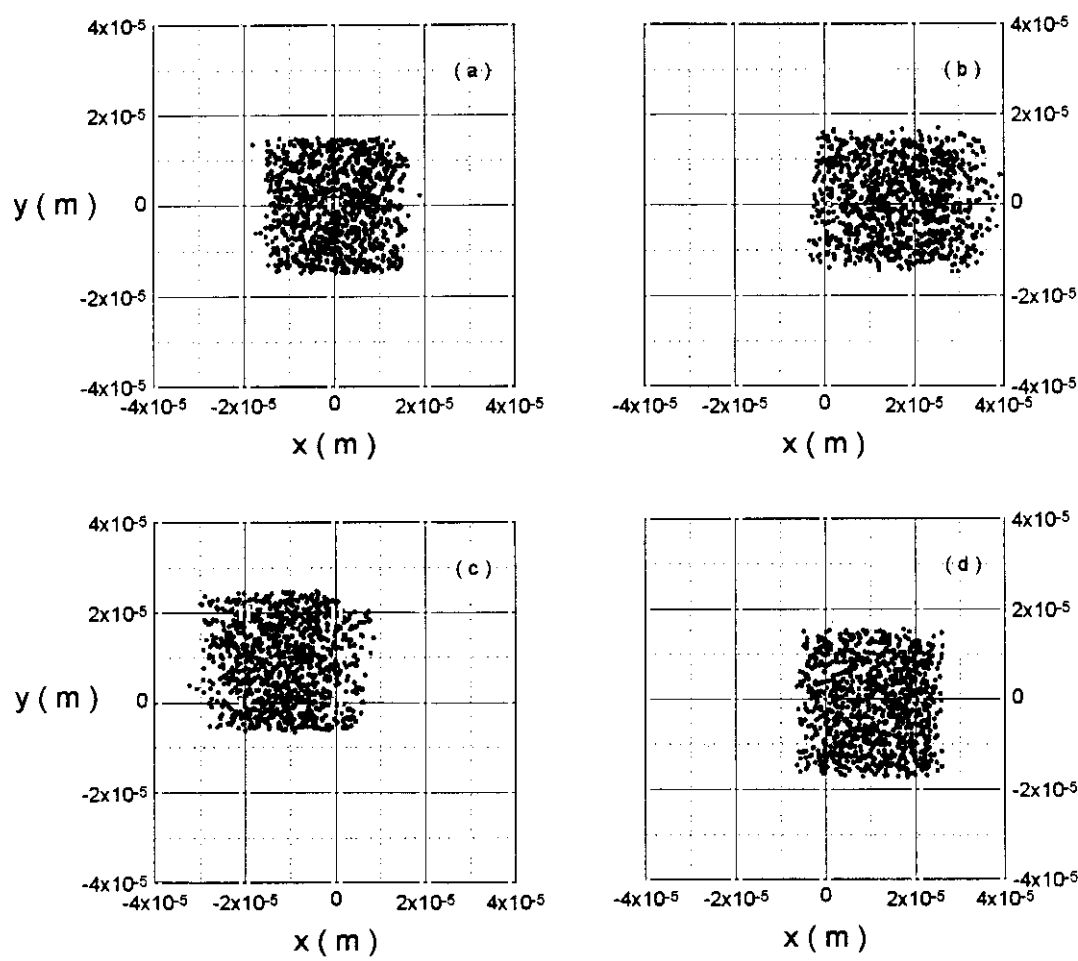


Figura 3.19 Efecto de aberración mecánica producido por variaciones aleatorias en la longitud de los 16 electrodos para $em = 10^{-7} m$; a efectos de comparación se ha representado en (a) el spot con $\Delta l_e = 0$.

Para sistematizar el estudio, de todos los *spots* obtenidos hemos seleccionado 10 de ellos que presentan un 10% de incremento en el radio promedio respecto de los casos óptimos, y hemos calculado el valor medio del desplazamiento, d_{lat} , que se produce en las coordenadas que caracterizan el centro de cada *spot*. En la Tabla 3.6 se muestra las tolerancias relativas a la longitud de diseño, l_c , y el desplazamiento medio lateral, relativo a ρ_{av} de los *spots* óptimos, para las cuatro emitancias estudiadas.

$em(m)$	10^{-10}	10^{-9}	10^{-8}	10^{-7}
$\pm \frac{\Delta l_{cm}}{l_c}$	2.15×10^{-4}	5.74×10^{-4}	10.08×10^{-4}	35.89×10^{-4}
$\frac{d_{lat}}{\rho_{av}}$	14.77	5.69	1.64	1.45

Tabla 3.6 *Valores de la tolerancia relativa de la longitud de los cilindros y del desplazamiento medio lateral de la imagen, correspondientes a un incremento del 10% en el radio promedio de los spots óptimos. Estos valores se han promediado sobre 10 spots para cada emitancia.*

Vemos que el valor del cociente $\frac{d_{lat}}{\rho_{av}}$ disminuye con el aumento de la emitancia, así que este tipo de aberración afecta más a las emitancias bajas que a las altas. Lo mismo se puede decir para la deformación de los *spots*. En concreto mientras que para $em = 10^{-10} m$ la tolerancia exigida en la longitud de los cilindros es de $\pm 15 \mu m$, para $em = 10^{-7} m$ este valor sube a $\pm 250 \mu m$. Con los medios de los que actualmente se dispone, es posible mecanizar estas piezas incluso para las precisiones más exigentes obtenidas.

3.6 Bibliografía

- [1] F. Watt, *The nuclear microprobe: a unique instrument*, Nucl. Instr. and Meth. B **130**, 1-8, (1997).
- [2] G. J. F. Legge, *A history of ion microbeams*, Nucl. Instr. and Meth. B **130**, 9-19, (1997).
- [3] X. Jiye, *Aberration Theory in Electron and Ion Optics*, en: Adv. Electron. and Electron Phys. Supplement **17**, Caps. 1 y 3, (1986).
- [4] A. Septier, *Strong-Focusing Lenses*, en: Adv. Electron. and Electron Phys. **XIV**, 86-205, Academic Press, (1961).
- [5] M. L. J. James, G. M. Smith y J. C. Wolford, *Métodos Numéricos Aplicados*, International Textbook Company, Cap. 5, (1970).
- [6] M. L. Bullock, *Electrostatic Strong-Focusing Lens*, Phys. Rev. **98**, 264-268, (1955).
- [7] P. W. Hawkes y E. Kasper, *Electron Optics*, Academic Press, Cap. 39, (1989).
- [8] D. C. Carey, *The optics of charged particle beams*, Harwood Acad. Publ., Caps. 4 y 9, (1992).
- [9] A. D. Dymnikov y G. Martínez, *Charged Particle Microprobes with minimum Beam Spot Size for a given Beam Current*, Proceedings of the 14th Int. Conf. on Application of Accelerators in Research and Industry, AIP Press, 731-734, (1997).
- [10] A. D. Dymnikov y S. Y. Yavor, *Four quadrupole lenses as an analogue of an axially symmetric system*, Sov. Phys. Tech. Phys. **8**, 639-643, (1964).
- [11] A. D. Dymnikov, D. N. Jamieson y G. J. F. Legge, *Mathematical modelling of non-lineal magnetic quadrupole systems*, Nucl. Instr. and Meth. A **363**, 463-467, (1995).

- [12] A. D. Dymnikov y G. Martínez, *Optimal magnetic and electrostatic Russian Quadruplet microprobe lens system with high demagnification*, Nucl. Instr. and Meth. B **130**, 64-69, (1997).
- [13] R. G. Wilson y G. R. Brewer, *Ion beams*, John Wiley & Sons, Cap. 2, (1973).
- [14] L. Bischoff y J. Teichert, *Application of highly focused ion beams*, Proceedings of the 14th Int. Conf. on Application of Accelerators in Research and Industry, AIP Press, 1175-1178, (1997).
- [15] S. H. Sie y C. G. Ryan, *An electrostatic "Russian" quadruplet microprobe lens*, Nucl. Instr. and Meth. B **15**, 664-668, (1986).
- [16] P. W. Hawkes, *Focusing of charged particles*, Academic Press, Cap. 2, (1967).
- [17] M. I. Yavor y A. S. Berdnikov, *ISIOS: a program to calculate imperfect static charged particle optical systems*, Nucl. Instr. and Meth. A **363**, 416-422, (1995).
- [18] H. Wollnik, M. I. Yavor y A. G. Kalimov, *Low aberration focusing system for a proton nanoprobe*, Rev. Sci. Instrum. **69**, 4116-4119, (1998).

Conclusiones finales

Aportaciones más relevantes

La investigación reflejada en esta memoria se ha referido a métodos de análisis y diseño de sistemas electrostáticos para el enfoque de partículas cargadas. En concreto se ha centrado en:

- a) Síntesis de lentes cilíndricas para iones y electrones con energías del orden de keV.
- b) Síntesis de lentes cuadrupolares para el enfoque de iones con energías de MeV.

En ambos casos se propone y verifica un método que permite reducir al mínimo el efecto de las aberraciones geométricas de tercer orden y constituye una de las aportaciones más interesantes de este trabajo. Consiste en el *modelado del haz* previo a su entrada en la lente, lo que implica elegir una determinada geometría para la apertura objeto y el diafragma de tal forma que, de la totalidad del haz que llega, se selecciona la fracción que se ve menos afectada por este tipo de aberraciones.

Una vez especificado el punto de trabajo de la lente, la búsqueda de esta geometría para la optimización se hace mediante ensayo y error. Para ello se utiliza un modelo de aproximación analítica del potencial axial y sus derivadas, con lo que el proceso se puede realizar en un tiempo de cálculo razonable.

A continuación se lleva a cabo la conexión entre el modelo analítico y el numérico a fin de plasmar estos resultados en unas dimensiones concretas para los conductores que conforman la lente, y obtener sus correspondientes polarizaciones. Ello permitirá el montaje de las lentes de acuerdo con el punto de trabajo exigido.

Teniendo en cuenta que estas ideas son el hilo conductor que ha guiado nuestras investigaciones, presentamos un resumen de las conclusiones más importantes surgidas a lo largo del trabajo:

- 1) En el primer capítulo se plantea, como parte esencial del estudio, la resolución del problema electrostático en sistemas formados por conductores. Se ha propuesto el

método de elementos de contorno ya que se trata de una técnica muy potente y con un gran flexibilidad en lo que se refiere a la simulación de cualquier geometría. Se ha adaptado dicha técnica al análisis de sistemas cuadrupolares realizando varios refinamientos en el cálculo de los coeficientes de la ecuación matricial resultante. Se han efectuado varias comprobaciones computando el potencial sobre los electrodos, donde sabemos que su valor debe coincidir con el potencial aplicado. Mostramos las ventajas de efectuar una división no uniforme en los bordes del sistema y la elección del número adecuado de subsecciones. Para el cálculo del campo eléctrico se ha realizado otra discretización de las subsecciones en pequeñas subáreas que permite el uso de la aproximación de carga puntual sin una pérdida perceptible de precisión. Se ha realizado un estudio de la influencia del radio de los electrodos en el error del cálculo de potencial y se ha mostrado que es preferible trabajar con radios relativamente pequeños; en caso de ser necesario utilizar radios grandes, es recomendable aumentar el número de subáreas.

La segunda parte de este capítulo se dedica a exponer el problema de la integración de trayectorias en lentes electrostáticas. Como novedad, se presenta una ecuación relativista que será utilizada y comprobada en el diseño del acelerador de 150 keV. A continuación, se ha hecho un estudio comparativo de un grupo de algoritmos a fin de seleccionar el método más eficiente para nuestro estudio. Concluimos que en general los métodos de orden más alto, como Runge-Kuta y Dormand-Prince de 5ºorden, son más eficientes y hemos elegido para nuestro estudio este último.

2) En el segundo capítulo, se ha presentado un nuevo método de síntesis basado en la combinación del modelo aproximado de Dymnikov y nuestra simulación numérica, adaptado a lentes cilíndricas. En primer lugar se ha realizado un análisis comparativo a partir de las aproximaciones analíticas (Modelo de Dymnikov) y numéricas (BEM)

aplicadas a una lente de dos cilindros; al comparar los resultados se muestra la existencia de una penetración del potencial de referencia en la lente provocando una ligera perturbación. Hemos verificado que al añadir unos electrodos que apantallen la región de la lente con respecto al potencial de tierra se soluciona este tipo de problema.

Se ha realizado el diseño de una lente einzel. Aplicando la técnica de elementos de contorno se puede resolver el problema electrostático e integrar las dos trayectorias que determinan los coeficientes de la matriz de transferencia. Se ha mostrado que la coincidencia de la aproximación analítica con el potencial numérico es excelente y permite una concordancia muy buena entre los parámetros de la matriz de transferencia obtenidos por ambos modelos. Además la síntesis no es única, variando el radio de los cilindros y la separación entre ellos se consigue un comportamiento análogo en todos los casos al del modelo de Dymnikov.

Para simular el comportamiento del haz se ha elegido una representación por medio de diagramas de puntos. En la apertura objeto se lanzan un conjunto de trayectorias cuyas condiciones iniciales de posición y velocidad se fija según el punto de trabajo diseñado. Al integrar las trayectorias se obtiene un *spot* imagen cuya interpretación es esencial para sacar conclusiones acerca de la acción de la lente sobre el haz. Mediante esta simulación mostramos el proceso de optimización: se obtiene un *spot* de tamaño mínimo al utilizar las aperturas con la geometría óptima suministrada por el modelo analítico. Se presentan los resultados para emitancias entre $10^{-9}m$ y $10^{-6}m$.

Se ha extendido el método al caso de una lente aceleradora con una desmagnificación elevada y hemos mostrado las nuevas posibilidades que ofrece la combinación adecuada de los dos modelos utilizados en el diseño. Aun cuando no se pueda establecer una equivalencia total entre los parámetros que suministra la

aproximación analítica y los del modelo numérico, los primeros se pueden utilizar como guía de forma que nos lleven finalmente a un diseño optimizado que se ajusta bastante bien a las condiciones de trabajo especificadas.

3) El tercer capítulo está dedicada al estudio de sistemas cuádrupolares. Se ha caracterizado la unidad básica, es decir el cuádrupolo constituido por cuatro barras cilíndricas, aplicando una versión del BEM para estudiar, con gran precisión, la influencia de la geometría de los electrodos en los parámetros más representativos. Se ha realizado un estudio del coeficiente de forma, K_2 , que representa el comportamiento del potencial en la región donde se ignora los efectos de borde en función del radio de los electrodos. Se ha observado que el valor del coeficiente empírico δ , que relaciona los dos modelos, es siempre menor que uno, al contrario de lo que ocurre en los cuádrupolos magnéticos. Notemos que este es el primer estudio que muestra el comportamiento claramente diferente de los cuádrupolos electrostáticos.

Usando el mismo procedimiento que en el capítulo anterior, hemos hecho la síntesis de un cuádruplete tipo Dymnikov. Una vez determinadas las polarizaciones de los electrodos en función del radio de los cilindros, se ha aplicado el modelo numérico con el objeto de determinar el rango de geometrías que dan un *spot* de tamaño mínimo en el plano imagen. Se ha computado para cada emitancia una serie de *spots* para diferentes radios. Se ha observado que todos los *spots* obtenidos corresponden a la imagen gaussiana con un pequeño halo que se extiende algo más en la dirección del eje Ox ; se debe a que en esta dirección es donde más influyen las aberraciones. En conclusión, hemos encontrado que la síntesis no es única, ya que variando el radio de los electrodos se pueden obtener *spots* similares al definido como óptimo. Notemos, que dependiendo de la emitancia se deberá escoger la geometría con el radio más pequeño posible dentro de los que dan un *spot* óptimo con el fin de minimizar el riesgo de

ruptura eléctrica y asegurar un buen comportamiento desde el punto de las aberraciones geométricas.

Hemos analizado la influencia de la dispersión en energía del haz y la influencia de los defectos mecánicos en la calidad de la imagen obtenida. La simulación muestra que en los dos estudios existe una distorsión más apreciable en la dirección Ox . Además, en el caso de la aberración mecánica, la imprecisión en la longitud de los cilindros da lugar a un desplazamiento del *spot* en su conjunto. Concluimos que este tipo de aberraciones afecta más a las emitancias bajas que a las altas. Sin embargo las tolerancias exigidas en estos diseños son perfectamente alcanzables con la tecnología actual.

Futuros desarrollos

Consideramos que el estudio realizado puede constituir la base de nuevas investigaciones; en concreto las líneas que quedan abiertas y en las cuales pensamos proseguir nuestro trabajo son:

- 1) extensión del método propuesto al diseño de sistemas con simetría de rotación. Una vez fijadas las condiciones de trabajo, se realizará la síntesis siguiendo el mismo proceso de optimización que hemos mostrado. En particular se llevará a cabo el estudio de aceleradores para energías entre 50 keV y 2 MeV.
- 2) Construcción del acelerador de electrones a 150 keV. Está marcha un proyecto de colaboración con el Departamento de Fusión y Partículas Elementales del CIEMAT, en el que se está efectuando una evaluación tanto presupuestaria como técnica, con vistas a su montaje. En particular se está llevando a cabo un estudio del acoplamiento entre la fuente de electrones y el sistema de formación de haz.

- 3) Ampliación de los cálculos para el diseño de cuádrupletes electrostáticos. Dada la potencia del método numérico, se va a emplear en sistemas en los que no es posible ignorar la influencia entre cuádrupolos contiguos. Se tienen ya unos primeros resultados que se van a utilizar en el diseño y construcción de un cuádruplete para microirradiación de células en el RARAF de la Universidad de Columbia, siempre en estrecha colaboración con el Prof. Dymnikov.

Apéndice

A1. El modelo de Dymnikov

Esta basado en una formulación matemática denominada Método del Matrizante. Se trata de un formalismo relativista de una complejidad extraordinaria, que se podría esquematizar en las siguientes etapas [1]:

- a) Elección de la función analítica que describe aproximadamente el potencial en el eje del sistema en estudio.
- b) Caracterización del movimiento del haz de partículas cargadas mediante un método de matrices. Los desarrollos son válidos hasta tercer orden.
- c) Aplicación de un método de momentos al análisis de la función de distribución de las partículas para determinar el radio promedio del haz.

Aunque en su formulación más general admite incluir el tratamiento de carga espacial, la versión que se ha utilizado en este estudio no tiene en cuenta dicho efecto e ignora las colisiones entre partículas. El hecho de usar aproximaciones analíticas para el potencial axial y sus derivadas, hace que la computación sea muy rápida en comparación con otros modelos.

Potencial axial para lentes multicilindros

Trata de aproximarse al potencial debido a un conjunto de cilindros de igual longitud, igual radio, y separación constante entre ellos, polarizados alternativamente a potenciales 0 y V . Se tiene entonces una función periódica caracterizada por tramos en los que el potencial es constante (correspondiente a la región interior de los cilindros) y tramos en los que la función varía entre ambos valores de la polarización.

Si caracterizamos la zona a potencial constante por la longitud l_p y la de potencial variable por la longitud l_f , un semiperiodo de la función viene dado por las expresiones:

$$\phi(z) = 0, \quad \text{si } 0 \leq z \leq l_p/2 ;$$

$$\phi(z) = z^5 \left(\frac{V}{l_f^5} + (z - l_f) \left(-5 \frac{V}{l_f^6} + (z - l_f) \left(15 \frac{V}{l_f^7} + (z - l_f) \left(-35 \frac{V}{l_f^8} + 70 (z - l_f) \frac{V}{l_f^9} \right) \right) \right) \right)$$

$$\text{si } l_p/2 \leq z \leq l_p/2 + l_f ;$$

$$\phi(z) = V, \quad \text{si } l_p/2 + l_f \leq z \leq l_p + l_f ; \quad (\text{A1.1})$$

donde el origen, $z = 0$, se ha tomado en el centro de la zona a potencial cero. En cualquier otra región el potencial se puede obtener por traslación y teniendo cuenta las simetrías. Es interesante señalar que la función polinómica de grado nueve que describe la zona intermedia, tiene nulas las cuatro primeras derivadas cuando conecta con los potenciales extremos.

Figura de mérito ρ_{0min}

La determinación de la geometría óptima de las aperturas en este modelo se efectúa minimizando el radio promedio del haz que resulta de los cálculos llevados a cabo en el apartado c). La equivalencia entre este parámetro y el que nosotros utilizamos en la fórmula (2.51), se puede establecer a través de la relación

$$\rho_{0min} \approx r_1 \frac{\sum_{j=1}^N \sqrt{x_{ij}^2 + y_{ij}^2}}{\sum_{j=1}^N \sqrt{x_{oj}^2 + y_{oj}^2}}, \quad (\text{A1.2})$$

donde r_1 es el radio de la apertura objeto, (x_{oj}, y_{oj}) las coordenadas de los puntos objeto y (x_{ij}, y_{ij}) las coordenadas de los correspondientes puntos imagen.

Esto nos lleva a que en todos los cálculos realizados $\rho_{0min} \approx 1.3 \rho_{av}$.

A2. Extensión del método numérico al estudio de otras configuraciones cuadrupolares

Como ya se ha comentado, la flexibilidad del método de elementos de contorno permite abordar con relativa facilidad el estudio de geometrías más complejas que las analizadas en el capítulo 3. Así, en este apéndice vamos a presentar dos ejemplos en los que es preciso tener en cuenta la influencia entre cuadrupolos contiguos. En ambos casos las dimensiones de los sistemas vienen dadas desde los laboratorios.

El cuádruplete del CSIRO¹

Se trata de un sistema que forma parte de una microsonda de un haz de protones de 3 MeV de energía y 0.1 nA de intensidad. Fue diseñado para el análisis de trazas en minerales [2]. En la Figura A2.1 se muestra la geometría de la configuración. En una longitud de 312 mm se disponen cuatro cuadrupolos con cilindros de igual longitud

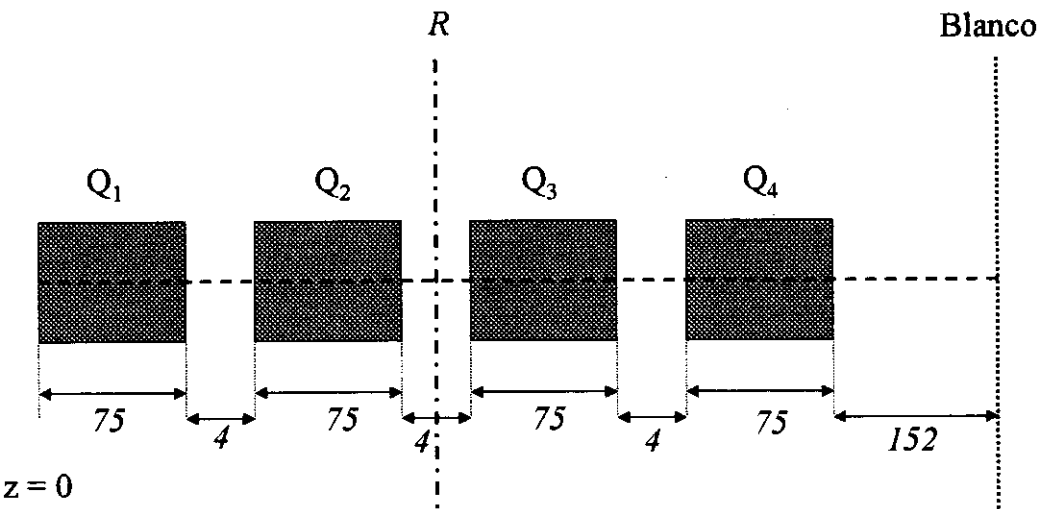


Figura A2.1 Geometría de la configuración del cuádruplete de CSIRO. Las longitudes se expresan en mm.

¹ CSIRO Heavy Ion Analytical Facility, P.O. Box 136, North Ryde, NSW 2113, Australia.

$l_c = 75\text{mm}$, radio $r_c = 3.175\text{mm}$, y apertura $a = 3.175\text{mm}$. La separación entre cuadrupolos es de 4mm , lo que obliga a resolver el problema electrostático para los 16 conductores simultáneamente. El número total de subáreas a considerar en este caso es de 5824, pero la existencia de varios planos de simetría –los propios de cada cuadrupolo y el plano medio R – así como la forma en que se polarizan los electrodos permite reducir el problema a la resolución de un sistema de 364 ecuaciones.

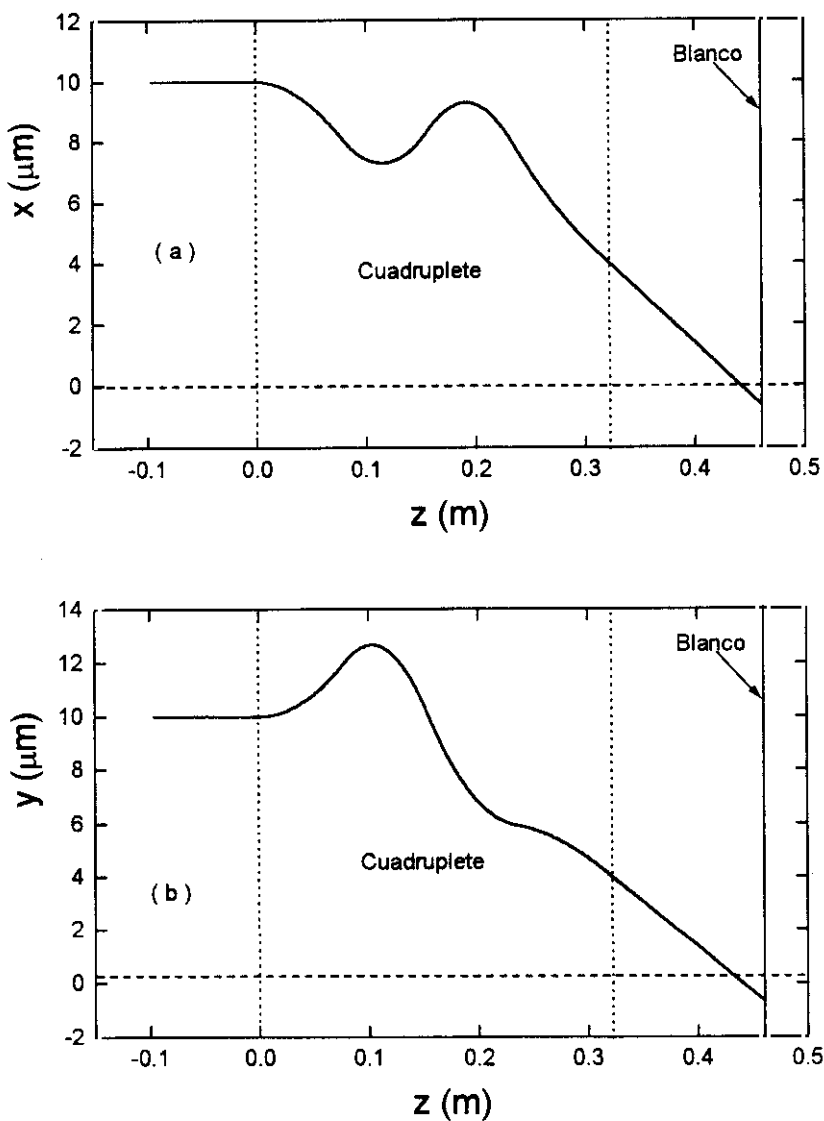


Figura A2.2 Trayectorias en el cuadruplete del CSIRO. (a) el rayo entra paralelo al eje en el plano Oxz; (b) Idem en el plano Oyz.

En el experimento la apertura objeto se encuentra a 4.2 m del primer cuadrupolo y el blanco a 152 mm del último cuadrupolo. Imponiendo la condición estigmática, se obtiene una simulación aproximada del funcionamiento del sistema. Ello obliga a polarizar los electrodos con los valores $V_1 = 1.880\text{ kV}$, $V_2 = -4.950\text{ kV}$. La Figura A2.2 muestra las trayectorias de dos rayos que llegan paralelos en los planos Oxz y Oyz . Observamos que esta lente trabaja en el primer rango de operación y tiene desmagnificaciones negativas, $D_x = D_y = -13.2$.

La Tabla A2.1 muestra una comparación de los valores teóricos calculados por los autores Sie y Ryan y de los obtenidos en nuestra simulación, con los resultados experimentales.

	$V_1\text{ (kV)}$	$V_2\text{ (kV)}$	\mathcal{D}
Sie y Ryan	1.870	-4.910	-13.6
Presente trabajo	1.880	-4.950	-13.2
Experimento	2.050	-5.230	$\sim (-10)$

Tabla A2.1 *Comparación de los valores simulados con los experimentales en el cuádruplete del CSIRO.*

Los valores muestran un acuerdo excelente entre los dos modelos de simulación y discrepancias del orden del 8% y del 5% en las polarizaciones comparadas con las experimentales. Los autores del trabajo las justifican por la interacción del sistema con un triplete magnético previo a esta lente, que puede producir una menor distancia efectiva del objeto.

Cuadruplete del RARAF²

Es un sistema actualmente en construcción y será utilizado para irradiar células de tejidos biológicos con alto grado de resolución [3]. Se trata de un cuadruplete corto cuyas dimensiones referidas a la Figura 3.9 son $s_1 = s_3 = 1.5\text{ cm}$, $s_2 = 2.5\text{ cm}$, $a = 5\text{ mm}$, $g = 0.1\text{ m}$, $l_t = 1.3\text{ m}$. Además el radio de los cilindros se ha fijado en $r_c = 5\text{ mm}$. Notemos que con respecto al cuadruplete diseñado en el capítulo 3, ahora la separación entre el segundo y tercer cuadrupolo es mucho más pequeña. Otra diferencia está en las longitudes efectivas que son distintas: el primero y el último de los cuadrupolos están caracterizados por $L_1 = L_4 = 3.5\text{ cm}$, y el segundo y tercero por $L_2 = L_3 = 7.0\text{ cm}$. Con todos estos datos, el modelo de Dymnikov obtiene para un haz de 3 MeV y una emitancia $em = 10^{-8}\text{ m}$ los valores óptimos de la geometría de las aperturas para la formación del haz: $r_{1op} = 11.017\text{ }\mu\text{m}$, $r_{2op} = 24.826\text{ }\mu\text{m}$ y $l_{12op} = 0.027\text{ m}$. Imponiendo la condición estigmática se encuentra que el sistema tiene una desmagnificación $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = -4.19$.

Ahora estamos en condiciones de realizar la síntesis de los parámetros geométricos y eléctricos que no han venido fijados desde el experimento.

Hemos hecho la simulación del sistema utilizando los mismos cálculos que en el cuadruplete del CSIRO, para tener en cuenta la posible influencia entre todos los elementos. También se ha puesto un número mayor de subáreas en los cuadrupolos interiores ya que en este caso son más largos. En la Tabla A2.2 se dan los parámetros que resultan de esta síntesis.

² RARAF, Columbia University, 136 So. Broadway, Irvington, N. Y., 10533, USA.

$V_1(kV)$	$V_2(kV)$	$l_{c1} = l_{c4}(cm)$	$l_{c2} = l_{c3}(cm)$
15.105	-15.250	3.042	6.543

Tabla A2.2 Polarizaciones y longitudes de los cilindros del cuadruplete RARAF.

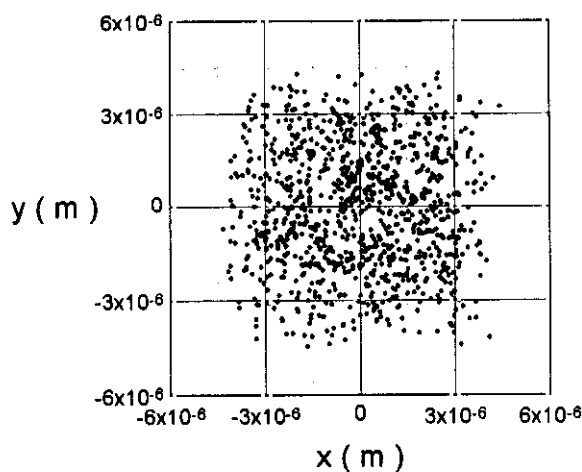


Figura A2.3 Spot imagen del cuadruplete RARAF para $em = 10^{-8} m$.

La Figura A2.3 muestra el *spot* imagen obtenido para una emitancia $em = 10^{-8} m$. Vemos que el halo que rodea a la imagen gaussiana es mayor que el resultante en nuestras síntesis optimizadas. Nosotros recomendaríamos trabajar a emitancias más bajas o incrementar el radio de los cilindros a la relación $r_c/a = 1.22$ que es la óptima para esta emitancia.

A3. Códigos de simulación

A lo largo de este trabajo ha sido necesario elaborar una gran cantidad de códigos incorporando los diferentes algoritmos que cada estudio requiere. Sin embargo la mayoría de ellos siguen el mismo proceso de cálculo y se pueden representar por un único diagrama de flujo como se muestra en la Figura A3.1. Con el fin de hacer un resumen de todos ellos, presentamos a continuación una tabla con sus principales características. Los tiempos de cálculo se han estimado para un ordenador tipo SGI-Cray ORIGIN 2000.

<i>Código</i>	<i>Aplicación</i>	<i>Memoria requerida (Mb)</i>	<i>Tiempo de cálculo /spot (min)</i>
LEINZEL	Diseño lente einzel de 3 cil.	3.2	24.3
LACEL	Diseño lente aceleradora 5 cil.	4.8	57.5
LACEREL	Acelerador de electrones. Ecs. relativistas	4.8	62.8
QUADRU	Diseño cuadruplete tipo Dymnikov	14.4	1147
QUADAC	Estudio aberración cromática	14.4	1148
QUADAM	Estudio aberración mecánica	91.3	1189

Tabla A3.1 *Valores estimados de la memoria y tiempo de computación de los principales códigos utilizados.*

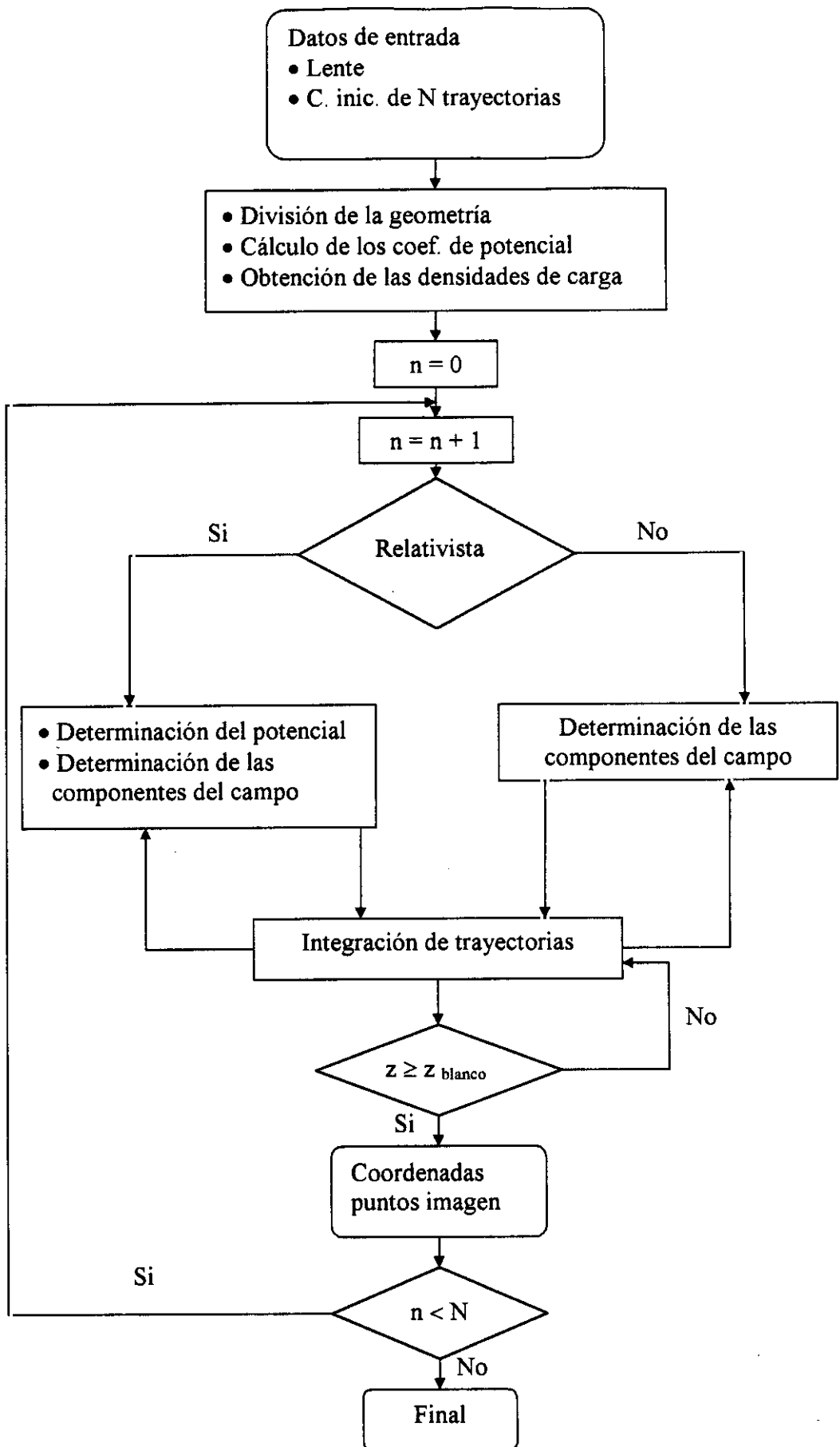


Figura A3.1 Diagrama de flujo del código de simulación de un spot imagen.

A4. Bibliografia

- [1] A. Dymnikov y R. Hellborg, *Matrix theory of the motion of a charged particle beam in curvilinear space-time*, Nucl. Instr. and Meth. A **330**, 323-362, (1993).
- [2] S. H. Sie y C. G. Ryan, *An electrostatic "Russian" quadruplet microprobe lens*, Nucl. Instr. and Meth. B **15**, 664-668, (1986).
- [3] <http://cpmcnet.columbia.edu/dept/radoncology/raraf/raraf3.htm>.

Publicaciones

Publicaciones a que ha dado lugar esta tesis

Autores: A. D. Dymnikov, G. Martínez y A. H. Azbaid

Título: The matrizant method for an optimal synthesis of electrostatic multiple cylinder lenses.

Revista: Nucl. Instr. and Meth. A **403**, 195-204 (1998).

Autores: A. H. Azbaid, A. D. Dymnikov y G. Martínez

Título: The influence of the rod diameter of electrostatic quadrupole lenses on the axial field and on the minimum spot size in nonlinear microprobes.

Revista: Proc. of the Charged Particle Optics III, San Diego, CA, SPIE **3155**, 205-213, (1997).

Autores: G. Martínez, A. D. Dymnikov y A. H. Azbaid

Título: Optimal synthesis of charged beam focusing systems.

Revista: Proc. of the 6th International seminar on Recent Trends in Charged Particle Optics and Surface Physics Instrumentation, Skalský Dvur, Brno, Czech Republic, 45-46, (1998).

Autores: G. Martínez, A. H. Azbaid y D. Dymnikov

Título: Numerical synthesis of an optimal microprobe focusing system.

Revista: Nucl. Instr. and Meth. A **427**, 344-349 (1999).

Autores: A. H. Azbaid, A. D. Dymnikov y G. Martínez

Título: The optimal construction of an electrostatic quadruplet as focusing microprobe system.

Revista: Nucl. Instr. and Meth. B. En prensa.

Autores: A. H. Azbaid, G. Martínez, A. D. Dymnikov y J. M. Bernal

Título: Electrostatic Russian quadruplet with high demagnification and minimum influence of geometric aberrations.

Revista: Enviado para publicar en J. Electron Microscopy.

Comunicaciones en congresos

Tipo de participación: Una comunicación (oral).

Congreso: SPIE'97- Charged Particle Optics III.

Lugar de celebración: San Diego, California, USA. Año: 1997.

Tipo de participación: Una comunicación (oral).

Congreso: Fifth International Conference on Charged Particle Optics.

Lugar de celebración: Delft, Países Bajos. Año: 1998.

Tipo de participación: Una comunicación (oral).

Congreso: 6th International Seminar on recent trends in Charged Particle Optics.

Lugar: Brno, República Checa. Año: 1998.

Tipo de participación: Una comunicación (oral).

Congreso: 6th International Conf. on Nuclear Microprobe Technology and Applications.

Lugar: Stellenbosch, Sudafrica. Año: 1998.